

# **Einfluss der thermischen Stabilität organischer Peroxide auf quelltermrelevante Wärmeströme wechselwirkender Poolfeuer**

## **Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

– Dr. rer. nat. –

vorgelegt von

**Stefan Schälike**

geboren in Oberhausen

Institut für Technische Chemie I

der

Universität Duisburg-Essen

**2013**

Die vorliegende Arbeit wurde im Zeitraum von April 2010 bis Mai 2013 unter wissenschaftlicher Betreuung von Prof. Dr. Axel Schönbucher, Lehrstuhl für Technische Chemie I an der Universität Duisburg-Essen durchgeführt.

Die Arbeit ist Teil des IGF-Vorhabens 396 “Abschätzung des Gefahrenpotentials von wechselwirkenden Bränden beim Umgang mit entzündbaren und selbst zersetzlichen Flüssigkeiten in verfahrenstechnischen Anlagen” der drei Forschungsstellen, Universität Duisburg-Essen, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM, Berlin) und Karlsruher Institut für Technologie (KIT).

Tag der Disputation: 18.10.13

Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Axel Schönbucher  
Prof. Dr.-Ing. Henning Bockhorn  
Prof. Dr. rer. nat. Klaus-Dieter Wehrstedt

Vorsitzender: Prof. Dr. rer. nat. Eckart Hasselbrink

## **Erklärung**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit mit dem Titel

“Einfluss der thermischen Stabilität organischer Peroxide auf quelltermrelevante Wärmeströme wechselwirkender Feuer”

selbst verfasst und keine, außer den angegebenen Hilfsmitteln und Quellen benutzt habe, und dass die Arbeit in dieser oder ähnlicher Form noch bei keiner anderen Universität eingereicht wurde.

Berlin, im Mai 2013

Stefan Schälike





# Danksagung

Für die Überlassung des Themas, die wissenschaftliche Betreuung sowie für seine wertvollen Anregungen und stetige Diskussionsbereitschaft, gilt mein ganz besonderer und herzlicher Dank Herrn Professor Dr. Axel Schönbucher, Lehrstuhl für Technische Chemie I der Universität Duisburg-Essen.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Henning Bockhorn, Engler-Bunte-Institut für Verbrennungstechnik, Karlsruher Institut für Technologie (KIT) gilt mein großer Dank für die Übernahme des Gutachtens, sowie für seine wertvollen Anregungen und seine Diskussionsbereitschaft.

Für die Übernahme des Gutachtens, den fachlichen Austausch und die vielfältige Unterstützung, wie z.B. für die Ermöglichung der experimentellen Untersuchungen an Poolfeuern, danke ich sehr herzlich Herrn Prof. Dr. Klaus-Dieter Wehrstedt, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Fachbereich "Reaktionsfähige Stoffe und Stoffsysteme", Berlin.

Herrn Prof. Dr. Eckart Hasselbrink, Lehrstuhl für Physikalische Chemie, Universität Duisburg-Essen, danke ich für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Frau Dr. Heike Michael-Schulz, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Arbeitsgruppe "Explosive Stoffe der chemischen Industrie", danke ich für die Unterstützung bei den administrativen Aufgaben.

Mein besonderer Dank gilt den Mitarbeitern der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), deren Einsatz maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat, insbesondere der Arbeitsgruppe "Explosive Stoffe der chemischen Industrie". Namentlich Herrn Dipl.-Ing. Marek Gebauer, Herrn Olaf Mücke, Herrn Dr.-Ing. Michael Rudolph, Frau Sylvia Ziemann, Herrn Tobias Nauendorf, Frau Bianca Fourier, Herrn Dipl.-Ing. Jochen Kebben, Herrn Michael Bulin, Herrn Dr. Marcus Malow, Frau Dr. Anka Berger, Herrn Dietmar Näther und Herrn Dr.-Ing. Kirti Bhushan Mishra.

Frau Nadine Thomalla und Frau Sabine Mudlaff, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, danke ich für die Unterstützung bei den organisatorischen und administrativen Aufgaben.

Für die zahlreichen Fachgespräche und seine vielen praktischen Anregungen möchte ich mich bei Herrn Dr. Wolfgang Laarz, Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Technische Chemie I, bedanken. Für die Unterstützung bei

der Beschaffung von Geräten im Rahmen des IGF-Vorhabens danke ich dem Lehrstuhl für Technische Chemie I, insbesondere Herrn Dipl.-Ing. Chem. Dieter Jacobi.

Für die Hilfe bei administrativen Aufgaben bedanke ich mich bei Frau Roswitha Nordmann-Silberg, Lehrstuhl für Technische Chemie II und Frau Gudrun Ciolek, Dekanatssekretärin, Universität Duisburg-Essen.

Großen Dank an Frau Dipl.-Ing. Margit Hahn, Marl und der LANXESS Buna GmbH, Marl für die Bereitstellung von n-Hexan und an Frau Dipl. Chem. Gudrun Dischl der United Initiators GmbH, Pullach für die Bereitstellung von Di-tert-butylperoxid.

Für die finanzielle Unterstützung im Rahmen des IGF-Vorhabens 396 möchte ich mich bei der AiF Allianz Industrie Forschung, Köln, bedanken.

Bei der Max-Buchner-Forschungstiftung der DECHEMA e.V., Frankfurt am Main, möchte ich mich für die finanzielle Unterstützung meiner Arbeit bedanken.

Abschließend möchte ich mich ganz herzlich bei meiner Frau Julia, meinen Eltern und meinen Freunden bedanken, die mir in dieser Zeit geduldig zur Seite standen.

# Zusammenfassung

Die wesentlichen charakteristischen Eigenschaften von nicht-vorgemischten Flammen flüssiger organischer Peroxide (OP) und flüssiger Kohlenwasserstoffe (KW) werden zusammenfassend dargestellt und diskutiert. Zudem werden die fluidodynamischen und chemischen Vorgänge in solchen Flammen kurz beschrieben. Ein besonderer Schwerpunkt bildet die zusammenfassende Darstellung der noch wenig untersuchten, aber bedeutsamen Wechselwirkung von  $N$  Feuern in einer Matrixanordnung.

Mit einem neuartigen Versuchsaufbau werden Experimente an DTBP- und  $n$ -Heptan-Poolfeuern im Labor- und Feldmaßstab zur Bestimmung der Massenabbrandraten  $\dot{m}''$ , der relativen zeitlich-gemittelten Flammenlängen  $\bar{H}/d$  und maximalen Flammenlängen  $H_{\max}/d$ , der spezifischen Ausstrahlung  $\overline{SEP}$  und der Bestrahlungsstärken  $E$  erstmals an wechselwirkenden DTBP- und  $n$ -Heptan-Poolfeuern ( $2 \leq N \leq 9$  mit Pooldurchmesser  $d$  im Bereich  $0.06 \text{ m} \leq d \leq 1.5 \text{ m}$ ), als Funktion des relativen Wechselwirkungsabstandes  $D/d$  zwischen den Pools, durchgeführt. Zur Bestimmung der Brennstofftemperaturen  $T_f$  während des Abbrandes werden Mantelthermoelemente des Typs K (Ni-CrNi) verwendet, wogegen zur Messung der Flammentemperatur  $T_F$ , Thermoelemente in einem Keramikmantel mit offenen Thermoperlen des Typs S (PtRh-Pt) eingesetzt werden. Mit Ellipsoidal-Radiometern wird die Bestrahlungsstärke  $E$  als Funktion des relativen Abstandes  $\Delta y/d$  von der Poolwand gemessen. Außerdem wird die  $\overline{SEP}(D/d)$  mittels IR-Kamera-Systemen bestimmt.

Im Kontext der CFD-Simulation (ANSYS FLUENT 14.5) werden die Erhaltungsgleichungen, die Turbulenz-, Verbrennungs- und Strahlungsmodellierung bewertend diskutiert sowie die Durchführung der Simulationen beschrieben.

Die Wärmerückströme in KW- und DTPB-Poolfeuern infolge Wärmeleitung  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$ , Wärmeübergang  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  und Wärmestrahlung  $\dot{Q}_{ba,rad}$  werden berechnet. Im Fall von Peroxid-Poolfeuern wird die Energiebilanz (Energie-Rückkopplungsmechanismus) an der Phasengrenzfläche um einen zusätzlichen Wärmestrom  $\dot{Q}_d$ , infolge einer Zersetzungsreaktion in der Flüssigkeit, erweitert. Der zusätzliche Wärmestrom  $\dot{Q}_d$  wird mit der Annahme einer exothermen Flüssigphasenreaktion in einer dünnen Schicht, die als idealer, isothermer, kontinuierlicher Rührkesselreaktor modelliert wird, berechnet. Es zeigt sich, dass für DTBP-Einzelpoolfeuer ( $d = 6 \text{ cm}$ ,  $d = 3 \text{ m}$ ) die Wärmeströme  $\dot{Q}_{ba,rad}$  sowie  $\dot{Q}_d$  dominieren. Dagegen dominieren in einem  $n$ -Heptan-Einzelpoolfeuer ( $d = 6 \text{ cm}$ ) die Wärmeströme  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  sowie  $\dot{Q}_{ba,rad}$ , während in einem  $n$ -Heptan-Einzelpoolfeuer ( $d = 3 \text{ m}$ )

der Wärmestrom  $\dot{Q}_{\text{ba,rad}}$  dominiert. Außerdem gelten für die Wärmeströme die Verhältnisse  $\dot{Q}_{\text{ba,rad,DTBP}}/\dot{Q}_{\text{ba,rad,KW}} \approx 12.4$  bei  $d = 6$  cm sowie  $\approx 2$  bei  $d = 3$  m.

Die Massenabbrandraten  $\dot{m}_f''$  von Peroxid-Einzelpoolfeuern sind aufgrund des zusätzlichen Wärmestromes  $\dot{Q}_d$  bis zu einem Faktor 6 größer und wenig vom Pooldurchmesser abhängig. Auf der Basis von Energiebilanzen wird eine neue Modellvorstellung zur Beschreibung der Massenabbrandraten von KW- und Peroxid-Poolfeuern mit physikalischen Einflussgrößen entwickelt. Die mit dem neuen Modell vorhergesagten Massenabbrandraten zeigen sowohl für KW- als auch für Peroxid-Poolfeuer eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

Es wird gezeigt, dass die für KW-Poolfeuer bisher geltenden Korrelationen mit der Brennstoff-Froude-Zahl, die gemessenen  $\bar{H}/d$  und gemessenen  $H_{\text{max}}/d$  von DTBP-Einzelfeuern unterschätzen. Die vorgestellten neuen empirischen Parameter für DTBP-Einzelfeuer werden insbesondere für die konservative Bestimmung von thermischen Abständen empfohlen.

In einer Matrixanordnung von wechselwirkenden Feuern entsteht im Raum zwischen den Poolfeuern infolge des Luft-Entrainments des inneren Poolfeuers ein Unterdruck, der abhängig vom Wechselwirkungsabstand  $D/d$  zu einer Flammenverschmelzung führt, die in drei Bereiche (Merging-Bereich, Übergangsbereich, Separierter-Bereich) unterteilt werden kann.

Die gemessenen und mit der CFD-Simulation vorhergesagten Flammentemperaturen eines wechselwirkenden KW-Poolfeuers sowie die experimentell bestimmten Flammentemperaturen eines DTBP-Poolfeuers ( $N = 5$ ,  $d = 6$  cm,  $D/d = 0.33$ ) sind bis zu 200 K höher als in einem DTBP-Einzelpoolfeuer und um 300 K höher als in einem KW-Einzelpoolfeuer. Ein Vergleich der experimentellen Flammentemperaturen  $T_F$  mit den CFD-simulierten Flammentemperaturen für ein wechselwirkendes n-Heptan Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  zeigt, dass die Lage der absoluten Maxima der Temperaturprofile richtig wiedergegeben werden.

Mit der CFD-Simulation werden transiente und zeitlich gemittelte Spezieskonzentrationen wechselwirkender n-Heptan Poolfeuer vorhergesagt. Mit einem Sauerstoffmassenanteil  $\bar{\gamma}_{\text{O}_2} = 0$  in der inneren Flamme einer Matrixanordnung ( $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$ ) erreicht der Sauerstoffmangel eine Höhe von  $x = 11$  cm. Zwischen den Pools sind aufgrund des erhöhten Luft-Entrainments Zonen mit erhöhtem  $\bar{\gamma}_{\text{O}_2}$  zu erkennen, wobei Werte bis zu  $\bar{\gamma}_{\text{O}_2} \leq 0.2$  erreicht werden. Es ist somit gezeigt worden, dass im Unterschied zum Einzelfeuer höhere  $\bar{\gamma}_{\text{O}_2}$  an Stellen vorliegen, an denen eigentlich Sauerstoffmangel herrscht. Diese

erhöhten  $\bar{\gamma}_{O_2}$  haben einen Einfluss auf die Art der sich bildenden Spezies, die an den Abbaureaktionen der KW-Ketten beteiligt sind. Zudem wurden  $CH_3$ -Radikale gefunden, die eine Hauptspezies der Crack-Produkte bei Brennstoffabbaureaktionen im unteren Bereich der Flamme darstellen, insbesondere in Regionen mit Sauerstoffmangel. Durch das im Vergleich zur Einzelflamme größere  $\bar{\gamma}_{O_2}$  wird die Bildung von OH-Radikalen bevorzugt. In den Flammenbereichen zwischen den Pools sind Massenanteile von  $\bar{\gamma}_{OH} = 6 \cdot 10^{-4}$  möglich.

Die Massenabbrandraten  $\dot{m}_f''$  wechselwirkender KW-Poolfeuer als Funktion vom Wechselwirkungsabstand  $D/d$  sind, im Vergleich zu einem Einzelpoolfeuer mit äquivalentem Durchmesser ( $d = d_{eq}$ ) um bis zu einem Faktor  $\approx 2.5$  (für  $N = 5$ ) höher. Die Massenabbrandraten wechselwirkender DTBP-Poolfeuer, sind im Unterschied dazu, um bis zu einem Faktor  $\approx 1.4$  erhöht. Die Zunahme der Massenabbrandraten wechselwirkender Poolfeuer kann durch die Erhöhung des Strahlungswärmerückstromes  $\dot{Q}_{ba,rad}$  infolge einer Verschmelzung der Flammensäulen und erhöhten Flammentemperaturen begründet werden. Die Zunahme von  $\dot{m}_f''$  ist abhängig vom Anteil  $\dot{Q}_{ba,rad}$  am gesamten Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,tot}$ . Das Verhältnis  $\dot{Q}_{ba,rad}/\dot{Q}_{ba,tot}$  ist bei wechselwirkenden KW-Poolfeuern um den Faktor  $\approx 1.44$  ( $N = 5$ ) größer als bei wechselwirkenden Peroxid-Poolfeuern, da Peroxid-Poolfeuer auch durch den zusätzlichen Wärmestrom  $\dot{Q}_d$  bestimmt werden und bereits bei einem Einzelpoolfeuer eine vergrößerte Querschnittsfläche des Flammenbodens ( $A_{Fb} > A_P$ ) aufweisen.

Das Verhältnis der relativen Flammenlängen  $\bar{H}/d_{eq}$  wechselwirkender KW-Poolfeuer sind für  $N = 2$  kürzer als die relativen Flammenlängen eines Einzelfeuer mit  $d = d_{eq}$ . Die relativen Flammenlängen von KW-Poolfeuer nehmen maximal um den Faktor 1.3 ab. Bei wechselwirkenden DTBP-Poolfeuern beträgt diese Faktor dagegen 1.2. Für  $N \geq 3$  nimmt dabei das Verhältnis der relativen Flammenlängen für KW-Poolfeuer dagegen nicht mehr ab und erreicht den Wert 1. Bei einem Bezug auf den Pooledurchmesser einer Einzelflamme ( $d = d_s$ ) nimmt das Verhältnis der relativen Flammenlängen  $\bar{H}/d$  um den Faktor 3.6 für KW-Poolfeuer und um den Faktor 1.6 für DTBP-Poolfeuer zu.

Wechselwirkende KW- und DTBP-Poolfeuer zeigen im Merging-Bereich in Abhängigkeit von  $D/d$  eine um den Faktor 2.4 höhere  $\overline{SEP}$ . Daraus ergeben sich in Abhängigkeit des Wechselwirkungsabstandes  $D/d$  aus den ebenfalls höheren Bestrahlungsstärken  $E$ , größere kritische thermische Abstände  $\Delta y_{crit}/d$ . Für KW-Poolfeuer ergibt sich eine maximale Zunahme von  $\Delta y_{crit}/d$  um den Faktor  $\approx 1.4$  und für DTBP-Poolfeuer um den Faktor  $\approx 2.5$ .

Die Schutzstreifendurchmesser nach TRbF 20 (für KW-Poolfeuer) und die Sicherheitsabstände nach BGV B4 (für DTBP-Poolfeuer) werden erstmals auf

der Basis physikalischer Modellvorstellungen diskutiert.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Zusammenfassung</b>	<b>vii</b>
<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>xv</b>
<b>1 Einleitung und Aufgabenstellung</b>	<b>1</b>
<b>2 Grundlagen von Pool-, Tank- und Lachenfeuern</b>	<b>5</b>
2.1 Grundlegende Flammentypen . . . . .	5
2.2 Schadenfeuer . . . . .	6
2.3 Physikalische Vorgänge . . . . .	9
2.4 Chemische Vorgänge . . . . .	14
2.4.1 Organische Peroxide . . . . .	14
2.4.2 Rußbildung . . . . .	18
2.5 Lachengröße bzw. Lachendurchmesser . . . . .	20
2.6 Abbrandgeschwindigkeit . . . . .	21
2.7 Massenabbrandrate . . . . .	23
2.8 Flammenlänge . . . . .	24
2.9 Flammenneigungswinkel . . . . .	27
2.10 Flammendrag . . . . .	28
2.11 Luft-Entrainment . . . . .	29
2.12 Strömungsgeschwindigkeiten . . . . .	30
2.13 Flammentemperaturen . . . . .	31
2.14 Modelle der thermischer Strahlung . . . . .	33
2.14.1 Semi-empirische Modelle . . . . .	33
2.14.2 OSRAMO II . . . . .	42
2.14.3 OSRAMO III . . . . .	46
2.14.4 Feldmodelle . . . . .	46
2.14.5 Integralmodelle . . . . .	47
2.14.6 Transiente Modelle . . . . .	47
2.15 Wechselwirkung zwischen Feuern . . . . .	48
<b>3 Experimentelles</b>	<b>53</b>
3.1 Brennstoffe . . . . .	53
3.2 Versuchsaufbau . . . . .	53
3.3 Massenabbrandraten . . . . .	56
3.4 Flammenlängen . . . . .	58
3.5 Flüssigkeits- und Flammentemperaturen . . . . .	60

3.6	Spezifische Ausstrahlung und Bestrahlungsstärken . . . . .	63
<b>4</b>	<b>CFD Simulation</b>	<b>67</b>
4.1	Erhaltungsgleichungen . . . . .	68
4.2	Turbulenzmodellierung . . . . .	72
4.2.1	Direkte Numerische Simulation . . . . .	73
4.2.2	Wirbelviskositäts-Modelle . . . . .	74
4.2.3	Detached Eddy-Simulation . . . . .	76
4.3	Verbrennungsmodelle . . . . .	78
4.3.1	Flammen mit unendlich schneller Chemie . . . . .	79
4.3.2	Flammen mit endlich schneller Chemie . . . . .	80
4.4	Strahlungsmodell . . . . .	89
4.5	Durchführung der CFD-Simulation . . . . .	91
<b>5</b>	<b>Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>97</b>
5.1	Wärmeströme bei KW- und DTBP-Einzelpoolfeuern . . . . .	97
5.1.1	Wärmerückstrom von KW-Poolfeuern . . . . .	97
5.1.2	Einfluss der thermischen Stabilität auf den Wärmerückstrom	98
5.1.3	Flammentemperaturprofile . . . . .	103
5.1.4	Berechnung des Wärmerückstroms bei KW-Poolfeuern . .	104
5.1.5	Berechnung des Wärmerückstroms bei DTBP-Poolfeuern .	106
5.2	Energiebilanzen von KW- und DTBP-Einzelpoolfeuern . . . . .	110
5.2.1	Massenabbrandraten von KW-Poolfeuern . . . . .	110
5.2.2	Einfluss der thermischen Stabilität auf die Massenabbrandra- ten organischer Peroxide . . . . .	111
5.3	Flammenlängenkorrelationen von DTBP-Poolfeuern . . . . .	114
5.4	Wärmeströme und Energiebilanzen wechselwirkender KW- und DTBP-Poolfeuer . . . . .	118
5.4.1	Flammenverschmelzung . . . . .	118
5.4.2	Flammentemperaturprofile von KW- und DTBP-Poolfeuern	123
5.4.3	CFD-vorhergesagte Flammentemperaturprofile eines KW-Poolfeuers . . . . .	126
5.4.4	Vorhergesagte Konzentrationsfelder von $\text{O}_2$ , OH-, $\text{CH}_3$ - Radikalen in einem KW-Poolfeuer . . . . .	128
5.4.5	Berechnung des Wärmerückstroms eines KW-Poolfeuers .	132
5.4.6	Berechnung des Wärmerückstroms eines DTBP-Poolfeuers	133
5.4.7	Massenabbrandraten von KW-Poolfeuern . . . . .	134
5.4.8	Massenabbrandraten von DTBP-Poolfeuern . . . . .	138
5.5	Flammenlängen von wechselwirkenden Poolfeuern . . . . .	141
5.5.1	Flammenlängen von KW-Poolfeuern . . . . .	141
5.5.2	Flammenlängen von DTBP-Poolfeuern . . . . .	149



---

5.6	Spezifische Ausstrahlung von wechselwirkenden Poolfeuern . . . .	157
5.6.1	Gemessene und vorhergesagte spezifische Ausstrahlung von KW-Poolfeuern . . . . .	157
5.6.2	Gemessene spezifische Ausstrahlung von DTBP-Poolfeuern	160
5.7	Bestrahlungsstärken von wechselwirkenden Poolfeuern . . . . .	162
5.7.1	Bestrahlungsstärken von KW-Poolfeuern . . . . .	162
5.7.2	Bestrahlungsstärken von DTBP-Poolfeuern . . . . .	163
5.8	Thermische Abstände von wechselwirkenden Poolfeuern . . . . .	165
5.8.1	Thermische Abstände von KW-Poolfeuern . . . . .	165
5.8.2	Thermische Abstände von DTBP-Poolfeuern . . . . .	167
<b>6</b>	<b>Sicherheitstechnische Folgerungen</b>	<b>171</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>173</b>
	<b>Publikationsliste</b>	<b>183</b>
	<b>Lebenslauf</b>	<b>187</b>



# Formelzeichen

## Lateinische Formelzeichen

$A_{cl}$	$[m^2]$	Oberfläche der klaren, nicht rußbedeckten Flamme
$A_F$	$[m^2]$	Flammenoberfläche
$A_{Fb}$	$[m^2]$	Flammenbodenfläche
$A_{hs}$	$[m^2]$	Oberfläche der leuchtenden Spots
$A_L$	$[m^2]$	Querschnittsfläche der Lache
$A_P$	$[m^2]$	Querschnittsfläche des Pools oder Tanks
$A_{SZ}$	$[m^2]$	Oberfläche der Rußzone (SZ)
$A_w$	$[m^2]$	Querschnittsfläche der Poolwand; $A_w = \pi(r_a^2 - r_i^2)$
$a_{hs}$	$[-]$	Flächenanteil aller hot spots; $a_{hs} = A_{hs}/A_F$
$a_s$	$[-]$	gemessener Flächenanteil der Rußflächen, verteilt über die gesamte Flamme
$a_{sp}$	$[-]$	Flächenanteil aller Rußballen; $a_{sp} = A_{sp}/A_F$
$a_{LZ}$	$[-]$	Flächenanteil der leuchtenden (nicht rußbedeckten) hot spots
$a_{SZ}$	$[-]$	Flächenanteil der Rußzone
$a_1$	$[-]$	Parameter in Gl. 5.32
$a_2$	$[-]$	Parameter in Gl. 5.32
$c$	$[mol/m^3]$	Stoffmengen-Konzentration
$c_p$	$[kJ/(kg \ K)]$	spezifische Wärmekapazität
$c_v$	$[kg/m^3]$	maximale Brennstoffkonzentration für kontinuierliche Flammenfortpflanzung
$C/H$	$[-]$	Kohlenstoff zu Wasserstoff-Atomverhältnis
$d$	$[m]$	Durchmesser eines Lachen-, Pool- oder Tankfeuer
$d_{eq}$	$[m]$	äquivalenter Durchmesser, der sich aus der Summe der N einzelnen Brennstoffoberflächen ergibt; Durchmesser eines äquivalenten Einzelfeuers
$d_s$	$[m]$	Durchmesser eines einzelnen Feuers in einer Matrixanordnung
$d_{opt}$	$[m]$	optische Weglänge bzw. optische Dicke der Flamme
$d_w$	$[m]$	infolge Flammen-Drag maximaler (vergrößerter) Pooldurchmesser in Windrichtung
$D_i$	$[m^2/s]$	Diffusionskoeffizient der Stoffspezies i

D	[m]	Wechselwirkungs-Abstand zwischen den Pools (von Poolaußenrand zu Poolaußenrand)
e	[J]	spezifische innere Energie
E	[kW/m <sup>2</sup> ]	Bestrahlungsstärke in einem Abstand $\Delta y$
E <sub>crit</sub>	[kW/m <sup>2</sup> ]	kritische Bestrahlungsstärke
E <sub>PSM</sub>	[kW/m <sup>2</sup> ]	Bestrahlungsstärke bezüglich dem Punktquellenstrahlungsmodell
f	[–]	Mischungsbruch
f <sub>s</sub>	[–]	Rußvolumenanteil
f <sub>rad</sub>	[–]	Strahlungsanteil der Flamme
g	[m/s <sup>2</sup> ]	Erdbeschleunigung
G	[kW/m <sup>2</sup> ]	einfallender Strahlungswärmestrom
h	[kJ/kg]	spezifische Enthalpie
– $\Delta h_{c,i}$	[kJ/kg]	spezifische Verbrennungsenthalpie der Komponente i
$\Delta h_{v,i}$	[kJ/kg]	spezifische Verdampfungsenthalpie der Komponente i
– $\Delta h_{d,i}$	[kJ/kg]	spezifische Zersetzungsenthalpie der Komponente i
H	[m]	sichtbare Flammenlänge
H <sub>cl</sub>	[m]	Länge der klaren Verbrennungszone
H <sub>pl</sub>	[m]	Länge der Plumezone
H <sub>pul</sub>	[m]	Länge der Pulsationszone
j	[kg/(m <sup>2</sup> s)]	Massenstromdichte
J	[kW/(m <sup>2</sup> s)]	Wärmestromdichte
k	[1/s]	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante
k	[J]	turbulente kinetische Energie
l <sub>i</sub>	[m]	charakteristische Länge des Strukturelements i
L	[W/(m <sup>2</sup> sr)]	Strahldichte
L <sub>b</sub>	[m]	mittlere Strahllänge
$\dot{m}_{ent}$	[kg/s]	Massenstrom infolge Luftentrainment
$\dot{m}_f$	[kg/s]	Brennstoff-Massenstrom
$\dot{m}_f''$	[kg/(m <sup>2</sup> s)]	Brennstoff-Massenabbrandrate
$\dot{m}_{f,max}''$	[kg/(m <sup>2</sup> s)]	maximale Brennstoff-Massenabbrandrate
M <sub>i</sub>	[kg/kmol]	molare Masse der Komponente i
N	[–]	Anzahl an Pools in einer Matrixanordnung
p	[kg/(m s <sup>2</sup> )]	Druck
$\dot{q}_f''$	[kW/m <sup>2</sup> ]	totale Wärmefreisetzungsrate pro Poolfläche

$\dot{Q}_{ba,\alpha}$	[kW]	Wärmerückstrom infolge des konvektiven Wärmeübergangs
$\dot{Q}_a$	[kW]	Wärmestrom von der Flamme in die Umgebung
$\dot{Q}_c$	[kW]	totale Wärmefreisetzungsrate (Brandleistung)
$\dot{Q}_{conv}$	[kW]	konvektiver Wärmestrom
$\dot{Q}_d$	[kW]	Wärmestrom infolge einer Zersetzungsreaktion in der flüssigen Phase
$\dot{Q}_{\Delta T}$	[kW]	Wärmestrom zur Erwärmung des Brennstoffs von $T_a$ nach $T_{f,bp}$
$\dot{Q}_{ba,\lambda}$	[kW]	Wärmerückstrom infolge Wärmeleitung von der Flamme zur Brennstoffoberfläche durch die Poolwand- Tankwandquerschnittsfläche
$\dot{Q}_{\lambda,f}$	[kW]	Wärmeleitungsstrom in der Flüssigkeit
$\dot{Q}_{rad}$	[kW]	totaler Wärmestrom infolge thermischer Strahlung von der Flamme in die Umgebung
$\dot{Q}_{ba,rad}$	[kW]	Wärmerückstrom infolge thermischer Strahlung von der Flamme zur Brennstoffoberfläche
$\dot{Q}_{ba,tot}$	[kW]	gesamter Wärmerückstrom infolge Strahlung, Wärmeleitung und Wärmeübergang der Flamme zur Brennstoffoberfläche
$\dot{Q}_v$	[kW]	Wärmestrom zur Verdampfung des Brennstoffs
$\dot{Q}_{verl}$	[kW]	Verlust-Wärmestrom zwischen Brennstoffballen und Umgebung
$r_i$	[mol/(m <sup>3</sup> s)]	Reaktionsgeschwindigkeit der Komponente i
$r_{pl}$	[m]	Radius zum Rand der Plumezone
$s$	[m]	Wegstrecke
$S$	[m <sup>2</sup> ]	Oberfläche
$S_u$	[m/s]	maximale Flammengeschwindigkeit für kontinuierliche Flammenfortpflanzung
SEP	[kW/m <sup>2</sup> ]	Surface Emissive Power; spezifische Ausstrahlung
SEP <sub>cl</sub>	[kW/m <sup>2</sup> ]	SEP im Bereich der klaren Verbrennungszone
SEP <sub>s</sub>	[kW/m <sup>2</sup> ]	SEP einer Rußschicht
SEP <sup>ma</sup>	[kW/m <sup>2</sup> ]	maximale SEP einer klaren Flamme ohne schwarze Rußschicht
SEP <sub>act</sub>	[kW/m <sup>2</sup> ]	aktuelle SEP nach OSRAMO II und OSRAMO III
$t$	[s]	Zeit
$t_{ch}$	[—]	charakteristische Zeitskala
$t_{max}$	[s]	Zeit zum Erreichen des maximalen Durchmessers
$T$	[K]	Temperatur

$T_{\text{ad}}$	[K]	adiabatische Flammentemperatur
$T_{\text{fp}}$	[K]	Temperatur der Brennstoffballen
$T_{\text{F}}$	[K]	Flammentemperatur
$T_{\text{hs}}$	[K]	Temperatur der hot spots
$T_{\text{max}}$	[K]	maximale Temperatur an der Flammenoberfläche
$T_{\text{sp}}$	[K]	Temperatur der Rußballen
$\Delta t$	[s]	Zeitintervall indem ein Temperaturanstieg bis zur Verdampfungstemperatur $T_v$ stattfindet
$u_c$	[m/s]	charakteristische Windgeschwindigkeit
$u_f$	[m/s]	Strömungsgeschwindigkeit des Brennstoffdampfs
$u_F$	[m/s]	Geschwindigkeit der Flammenfront
$u_w^*$	[-]	dimensionslose Windgeschwindigkeit
$u_w$	[m/s]	Windgeschwindigkeit
$u_w(10)$	[m/s]	Windgeschwindigkeit in $x = 10$ m Höhe
$U_A$	[-]	Umsatz eines Eduktes A
$v_a$	[m/s]	Abbrandgeschwindigkeit des Brennstoffs
$V$	[m <sup>3</sup> ]	Volumen
$w_i$	[-]	Massenbruch der Komponente i
$\tilde{x}_i, \tilde{y}_i$	[m/s]	Stoffmengenanteile der Komponente i in Dampfphase-, Flüssigkeitsphase
$x, y, z$	[m]	kartesische Koordinaten; x in Strömungsrichtung; Ursprung auf der Flüssigkeitsoberfläche
$x_f$	[m]	kartesische Koordinaten in der Flüssigphase in Strömungsrichtung; Ursprung auf der Flüssigkeitsoberfläche; $x_f < 0$
$Z$	[-]	Elementmassenbruch

### Griechische Formelzeichen

$\alpha$	[W/(m <sup>2</sup> K)]	Wärmeübergangskoeffizient
$\alpha_E$	[-]	Absorptionsgrad des Empfängerflächenelements
$\tilde{\alpha}$	[1/m]	modifizierter Absorptionskoeffizient
$\beta$	[-]	Korrekturfaktor bezüglich der mittleren Weglänge
$\beta$	[kg/(m <sup>2</sup> s)]	Parameter zur Beschreibungen der Massenabbrandrate
$\gamma$	[-]	Massenanteil

$\delta_{\text{rz}}$	[m]	Dicke der Reaktionszone, während des Abbrandes eines organischen Peroxids
$\epsilon$	[-]	Emissionsgrad
$\epsilon_{\text{F}}$	[-]	Emissionsgrad der grauen Flamme
$\epsilon$	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	turbulente Dissipation
$\Theta$	[°]	Flammenneigungswinkel
$\kappa$	[kg/(m <sup>2</sup> s)]	Volumenviskosität
$\lambda$	[W/(m K)]	Wärmeleitfähigkeit
$\lambda$	[m]	Wellenlänge
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte
$\rho_{\text{a}}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte der umgebenden Luft
$\rho_{\text{pl}}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte in der Plumezone
$\rho_{\text{v}}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte des Brennstoffdampfes
$\nu$	[m <sup>2</sup> /s]	kinematische Viskosität
$\nu_{\text{i}}$	[-]	stöchiometrischer Koeffizient in einer Reaktionsgleichung
$\tilde{\nu}$	[1/m]	Wellenzahl
$\sigma$	[W/(m <sup>2</sup> K <sup>4</sup> )]	Stefan-Boltzmann Konstante
$\sigma_{\text{s}}$	[-]	Streuungsgrad
$\eta$	[kg/(m s)]	dynamische Viskosität
$\eta_{\text{t}}$	[kg/m <sup>3</sup> ]	turbulente Viskosität, Wirbelviskosität
$\varphi$	[-]	Einstrahlzahl
$\phi$	[E]	skalare Größe; E: abhängig von der skalaren Größe
$\Phi$	[-]	Äquivalenzverhältnis
$\tau_{\text{at}}$	[-]	Transmissionsgrad zwischen Flamme und Empfängerflächenelement
$\tau_{\text{BB}}$	[-]	Transmissionsgrad der Brennstoffballen
$\tau$	[1/s]	Raumzeit eines kontinuierlichen Rührkesselreaktors
$\xi$	[1/s]	skalare Dissipation
$\chi$	[-]	Mischungsbruch
$\Omega$	[sr]	Raumwinkel

## Indizes

a      Umgebung

---

air	Luft
ax	axial
b	schwarzer Körper
ba	Rückstrom von der Flamme zur Brennstoffoberfläche
bp	Siedepunkt
bt	Brenndauer
c	Verbrennung
crit	kritisch
e	stationär bzw. im Gleichgewicht
eq	äquivalentes Einzelfeuer
E	Empfängerflächenelement
f	Brennstoff (fuel)
fp	Brennstoffballen (fuel parcel)
F	Flamme
Fb	Flammenboden
FF	Freilager-Freilager
FS	Freilager-Sozialgebäude
GG	Abstand zwischen zwei Tankgruppen
hs	hot spot
i	Stoffkomponente (Spezies)
int	integral
kol	Kolomogorov-Längenmaß
l	Flüssigkeit
ma	maximal, d. h. ohne Bedeckung mit schwarzem Ruß
merg	Merging-Bereich
min	am Minimum; mindest (Tank-)Abstand
n	normal
onset	Onset-Temperatur
re	Reaktionszone
rf	freigesetzter/verschütteter Brennstoff
s	single Feuer (Einzelfeuer)
sp	Rußballen (soot parcel)
SD	Schutzstreifendurchmesser
SADT	Self-Accelerating Decomposition Temperatur



---

stöch	stöchiometrisch
t	turbulent
tay	Taylor-Längenmaß
tc	Thermoelement
tran	Übergangsbereich
v	am Verdampfungspunkt
w	Wind
wa	Wand
z	zündfähig
$\lambda$	spektrale Größe

### Dimensionslose Kennzahlen

$Cr \equiv \frac{u \Delta t}{\Delta x}$	Courant-Zahl
$Fr_f \equiv \frac{\dot{m}_f''}{\rho_a \sqrt{g d}}$	Brennstoff-Froude-Zahl
$Fr_w \equiv \frac{u_w}{\sqrt{g d}}$	Wind-Froude-Zahl
$Re \equiv \frac{u d}{\nu}$	Reynolds-Zahl
$Re_w \equiv \frac{u_w d}{\nu_{air}}$	Wind-Reynolds-Zahl
$Da \equiv -\nu_1 \tau k$	Damköhler-Zahl 1. Ordnung

### Sonstige Formelzeichen

( - )	zeitlicher Mittelwert
( ' )	Schwankungsgröße
( " )	auf die Querschnittsfläche bezogene Größe
( ~ )	Favre gemittelte Größe
( $\vec{\phantom{x}}$ )	vektorielle Größe
< >	Ensemble Mittelwert
( $\dot{\phantom{x}}$ )	bezogen auf die Zeit
( $\hat{\phantom{x}}$ )	flächenbezogener Mittelwert
( $\parallel$ )	Größe im Feinstrukturfeld

### Abkürzungen

AF	asymmetrischer Fehlerbereich
CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direkte Numerische Simulation
DTBP	Di-tert-Butylperoxid
LEL	Untere (lower) Explosionsgrenze
LES	Large Eddy Simulation
MZFM	Modifiziertes Zylinder-Flammen-Strahlungs-Modell
NMFQ	normiertes mittleres Fehlerquadrat
RANS	Reynolds-Averaged-Navier-Stokes
RSM	Reynolds-Spannungs-Modell
PDF	Probability Density Function; Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
PSM	Punkt-Quellen-Strahlungsmodell; point source model
SFM	Zylinder-Flammen-Strahlungsmodell; solid flame model
TBPB	tert-Butylperoxybenzoat
TBPEH	tert-Butylperoxy-2-ethylhexanoat
UEL	Obere (upper) Explosionsgrenze

# 1 Einleitung und Aufgabenstellung

Kommt es während des Transports oder der Lagerung von flüssigen brennbaren Stoffen zu einer unfallbedingten Freisetzung und Zündung, kann es zu einem Pool-, Tank- oder Lachenfeuer, welches zu den nicht-vorgemischten, auftriebsbestimmten Flammen zählt, kommen. Durch diese Feuer kann es zu großen Schäden an benachbarten verfahrenstechnischen Anlagen und vor allem an Personen kommen [1]. Im Zusammenhang mit Mineralölprodukten hat es bisher weltweit über 500 große Schadenfeuer-Ereignisse gegeben [2]. Das große Gefahrenpotential von brennenden Mineralölprodukten und organischen Peroxiden (OP), besteht nicht allein beim Transport und der Lagerung, sondern auch beim weiteren Umgang, d. h. zusätzlich bei der Verarbeitung, Vermischung und beim Fortleiten derartiger Stoffe [3]. Eine Zunahme des Gefahrenpotentials ergibt sich aus dem Trend, größere Tanks bzw. Behälter, größere Stoffmengen sowie höher konzentrierte Zubereitungen zu verwenden. Als Beispiel für ein Großfeuer sei hier auf den Brand im Tanklager Buncefield nahe London (s. Abb. 1.1) mit bis zu 22 simultan brennenden Tankfeuern verwiesen. Vermutlich infolge einer 40-minütigen Überfüllung eines Tanks ( $d = 25 \text{ m}$ ) und der darauffolgenden Zündung einer sehr großen Benzindampf-Luft-Aerosolwolke hat sich ein Großfeuer ereignet [4].

Auch im Falle von entzündbaren und gleichzeitig selbst-zersetzlichen Flüssigkeiten, wie organischen Peroxiden, traten z. B. in Lagern mit Kunststoffbehältern und Großpackmitteln (IBC) ebenfalls größere Brände (Deutschland, 2002; Indien, 2005; Mexiko, 2005; USA, 2006) auf. Gegenwärtig werden ca. 50 OPs für technische Zwecke genutzt, die als technisch reine Stoffe und auch als Zubereitungen Verwendung finden. Diese Zubereitungen flüssiger OPs sind meist mit flüssigen Stoffen (Phlegmatisierungsmittel) desensibilisiert. Organische Peroxide werden als Radikalstarter bei Polymerisationsreaktionen zur Herstellung von Kunststoffen, als Härter für ungesättigte Polyesterharze oder als Vernetzer in der Gummiherstellung eingesetzt.

Eine realistische Beschreibung der Wechselwirkung von Poolfeuern und deren Auswirkungen ist daher nicht nur Gegenstand wissenschaftlichen Interesses sondern auch eine sicherheitstechnisch relevante Fragestellung, nicht erst seitdem neue Untersuchungen gezeigt haben, dass die Wechselwirkung insbesondere der thermischen Strahlung zwischen mehreren Feuern mit einer Erhöhung der Massenabbrandraten einhergeht [6]. Ziel sollte daher eine modifizierte Sicherheitsbetrachtung bei wechselwirkenden Pool-/Tankfeuern sein. Dabei sind

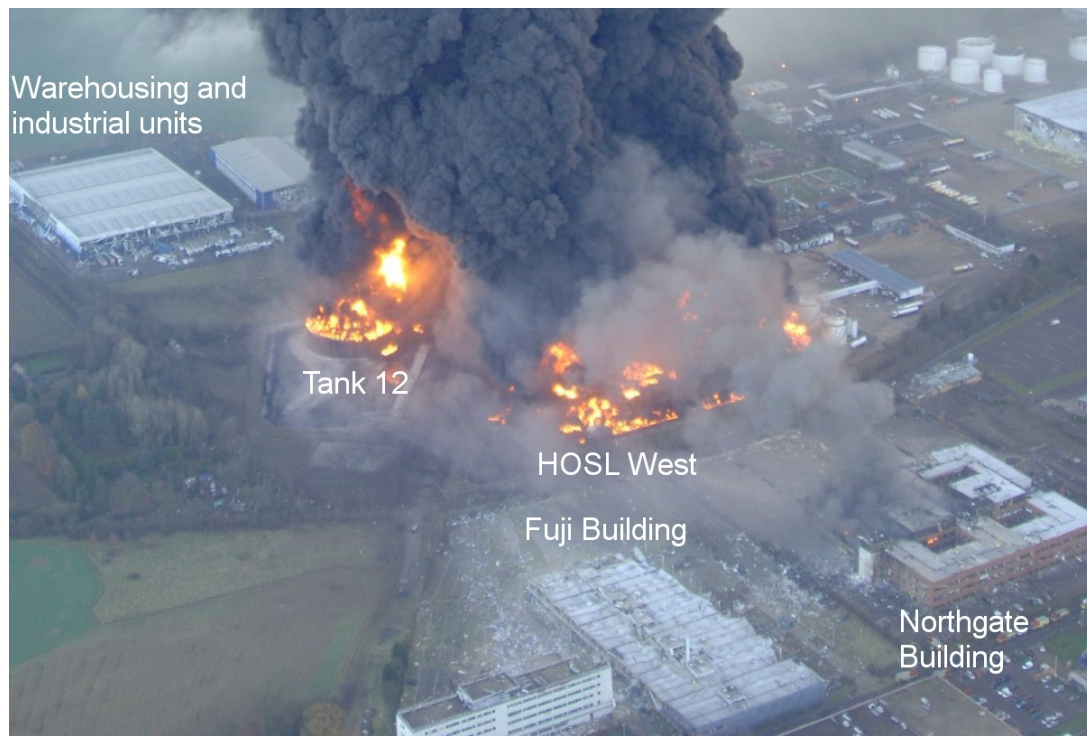


Abb. 1.1: Buncefield Areal am ersten Tag des wechselwirkenden Tankfeuers [5]

auch probabilistische Methoden zur Abschätzung des Schadensumfangs mit einzubeziehen [5].

Ein erster Schritt zur Erforschung der Wechselwirkung von Poolflammen ist die experimentelle Untersuchung im Labormaßstab. Insbesondere die Untersuchung der Massenabbrandraten, Flammenhöhen und Bestrahlungsstärken von wechselwirkenden Poolfeuern von Kohlenwasserstoffen (KW) und organischen Peroxiden ist von großer Bedeutung zur Erweiterung des Wissens über die Wechselwirkung von Bränden. Die gezielte experimentelle Untersuchung großer Poolflammen ist immer mit einem erheblichen Aufwand an Material, Zeit und Sicherheitsvorkehrungen verbunden, ist jedoch unverzichtbar für eine detaillierte wissenschaftliche Durchdringung.

In den letzten Jahrzehnten nimmt die Beschreibung von Schadenfeuern durch die Bilanzgleichungen der Strömungsmechanik und deren Lösung mit Hilfe der Computertechnik rasant zu [7], da sie Erkenntnisse über experimentell nicht oder schwer zu messende Parameter liefert und bei einmal entwickelter Lösungsstrategie die Berechnung verschiedener Szenarien ermöglicht. Durch stetige Weiterentwicklung ist heute eine Anwendung der numerische Strömungs-

mechanik (CFD, Computational Fluid Dynamics) auf immer komplexere Fragestellungen möglich. Eine direkte numerische Berechnung von Schadenfeuern ist zur Zeit, aufgrund der hohen Anforderungen an die Computer (Anzahl der Gitterzellen) und die zu erwartende lange Rechenzeit, noch unpraktikabel. Es wurden daher detaillierte Submodelle eingeführt, die eine möglichst gute Beschreibung bestimmter physikalischer und chemischer Prozesse bei verringertem Rechenaufwand ermöglichen [8, 9].

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sollen durch die Kombination von Experimenten und numerischer Simulation die folgenden Untersuchungen durchgeführt werden:

1. Es sollen die charakteristischen Eigenschaften von Pool-, Tank- und Lachenfeuern zusammenfassend dargestellt werden. Zudem sollen die fluiddynamischen und chemischen Vorgänge in Flammen kurz beschrieben werden.
2. Experimente im Labor- und Feldmaßstab zur Bestimmung der Massenabbrandraten, Flammenlängen, SEPs und Bestrahlungsstärken wechselwirkender Kohlenwasserstoff- und Peroxid-Poolfeuer sollen entwickelt werden. Die Untersuchungen sollen exemplarisch an DTBP und Hexan/Heptan als Leitsubstanzen durchgeführt werden.
3. Die Erhaltungsgleichungen für Gesamtmasse, Impuls, Speziesmassen und Energie sollen kurz diskutiert werden. Es soll eine Übersicht über die eingesetzten Submodelle, die Large-Eddy-Simulation, der assumed-PDF-Ansatz und das Discrete Ordinates Modell gegeben werden. Die Diskretisierung von Flamme und Umgebung sowie die Anfangs- und Randbedingungen sollen dargestellt werden.
4. Die Flammentemperaturen eines Di-tert-butylperoxid (DTBP) Poolfeuers sollen experimentell bestimmt und mit KW-Poolflammen (n-Heptan) vergleichend diskutiert werden.
5. Die Temperatur- und Spezieskonzentrationsprofile eines wechselwirkenden Heptan-Poolfeuers sollen mit der CFD-Simulation vorhergesagt werden.
6. Die Massenabbrandraten sollen aus den Energiebilanzen der Kohlenwasserstoff- und Peroxide-Poolfeuer hergeleitet werden.
7. Es soll eine Modell für die Massenabbrandraten flüssiger organischer Peroxid-Einzelpoolfeuer entwickelt werden.
8. Ein Modell für die Flammenlängen von Peroxid-Einzelpoolfeuern basierend auf der Brennstoff-Froude Zahl soll entwickelt werden.

9. Die Verschmelzung der Feuersäulen wechselwirkender DTBP- und Heptan-Poolfeuer soll in einer Matrixanordnung untersucht werden.
10. Die Massenabbrandraten, Flammenlängen und spezifischen Ausstrahlungen (SEPs) wechselwirkender DTBP- und Heptan-Feuer sollen in Labor- und Feldversuchen bestimmt werden. Die SEPs sollen mit der CFD-Simulation vorhergesagt werden.
11. Der Einfluss wechselwirkender Feuer auf die kritischen thermischen Abstände soll untersucht und mit den Abständen in den Regelwerken verglichen werden.

## 2 Grundlagen von Pool-, Tank- und Lachenfeuern

### 2.1 Grundlegende Flammentypen

Unter einer Verbrennung versteht man die sich selbsterhaltende Oxidation von Brennstoff, in der Regel von Kohlenwasserstoffen, unter der Abgabe von Wärme und Licht [10]. Dabei wird das Gebiet in dem die chemische Umsetzung schwerpunktmäßig stattfindet als Flamme bezeichnet. Flammen variieren stark in ihrer Struktur, Form, Größe und Temperatur in Abhängigkeit vom Brennstoff, der Versorgung mit Luft und den vorhandenen physikalischen Bedingungen. Daher ist eine Klassifizierung sinnvoll [8]:

#### Laminare Vormischflamme

Sind Brennstoff und Oxidationsmittel vorgemischt und die Strömung verhält sich laminar, spricht man von einer laminaren Vormischflamme. Laminare Vormischflammen führen zu einer weit weniger intensiven Wärmefreisetzung, wie die entsprechenden turbulenten Flammen. Verbrauchen sich der Brennstoff und das Oxidationsmittel gegenseitig vollständig unter Bildung von Kohlenstoffdioxid und Wasser liegt eine stöchiometrische Verbrennung ( $\Phi = 1$ ) vor:



Das relative Verhältnis aus Luft und Brennstoff wird dabei über das Äquivalenzverhältnis  $\Phi$  charakterisiert:

$$\Phi = \frac{(w_{\text{air}}/w_{\text{f}})_{\text{stöch}}}{w_{\text{air}}/w_{\text{f}}} \quad . \quad (2.1)$$

Liegt dagegen ein Überschuss von Brennstoff vor, heißt die Verbrennung fett ( $\Phi > 1$ ), bei Überschuss von Oxidationsmittel mager ( $\Phi < 1$ ).

#### Turbulente Vormischflammen

Hier brennt die Vormischflammenfront in einem turbulenten Geschwindigkeitsfeld wobei sich bei hinreichend kleiner Turbulenz lokal gekrümmte und gestreckte laminare Vormischflammenfronten ausbilden. Vorgemischte turbulente Verbrennung wird zur intensiven Verbrennung auf kleinstem Raum genutzt und hat

den Vorteil, dass sie weitestgehend rußfrei verläuft und hohe Temperaturen erzeugt werden, wie es z. B. im Otto-Motor realisiert ist. Das Vormischen explosionsfähiger Gemische von Brennstoff und Luft erfordert aber erhöhte Sicherheitsvorkehrungen, so dass die Bildung großvolumiger Gaswolken verhindert wird.

### **Laminare nicht-vorgemischte Flammen**

Der Brennstoff und das Oxidationsmittel werden bei laminarer Strömung erst während der Verbrennung gemischt. Da in nicht-vorgemischten Flammen ein Äquivalenzverhältnis  $0 \leq \Phi \leq \infty$  möglich ist, d.h., Verbrennung eines fetten Gemisches auf der Brennstoffseite, eines mageren Gemisches auf der Luftseite, sind komplexe Flammenfronten zu erwarten.

### **Turbulente nicht-vorgemischte Flammen**

Der Brennstoff und das Oxidationsmittel werden in einem turbulenten Geschwindigkeitsfeld erst während der Verbrennung gemischt. Aus den schon erwähnten Sicherheitsgründen wird den turbulent nicht-vorgemischten Flammen in industriellen Feuerungen und Brennern der Vorzug gegeben. Aufgrund der thermischen Strahlung von glühenden Rußteilchen, die in den brennstoffreichen Zonen gebildet werden, leuchten nicht-vorgemischte Flammen gelb.

## **2.2 Schadenfeuer**

In der chemischen und petrochemischen Industrie ist weltweit ein Anstieg der zu verarbeitenden, zu lagernden und zu transportierenden Mengen an brennbaren Stoffen zu verzeichnen [2]. Dadurch steigt das Gefährdungspotential durch eine störungsbedingte Freisetzung brennbarer Flüssigkeiten oder Gase (Abb. 2.2). Abhängig von der Freisetzungsart und den Randbedingungen können unterschiedliche Typen offener Feuer entstehen (Abb. 2.1), wobei sich die Feuer wie folgt unterteilen lassen.



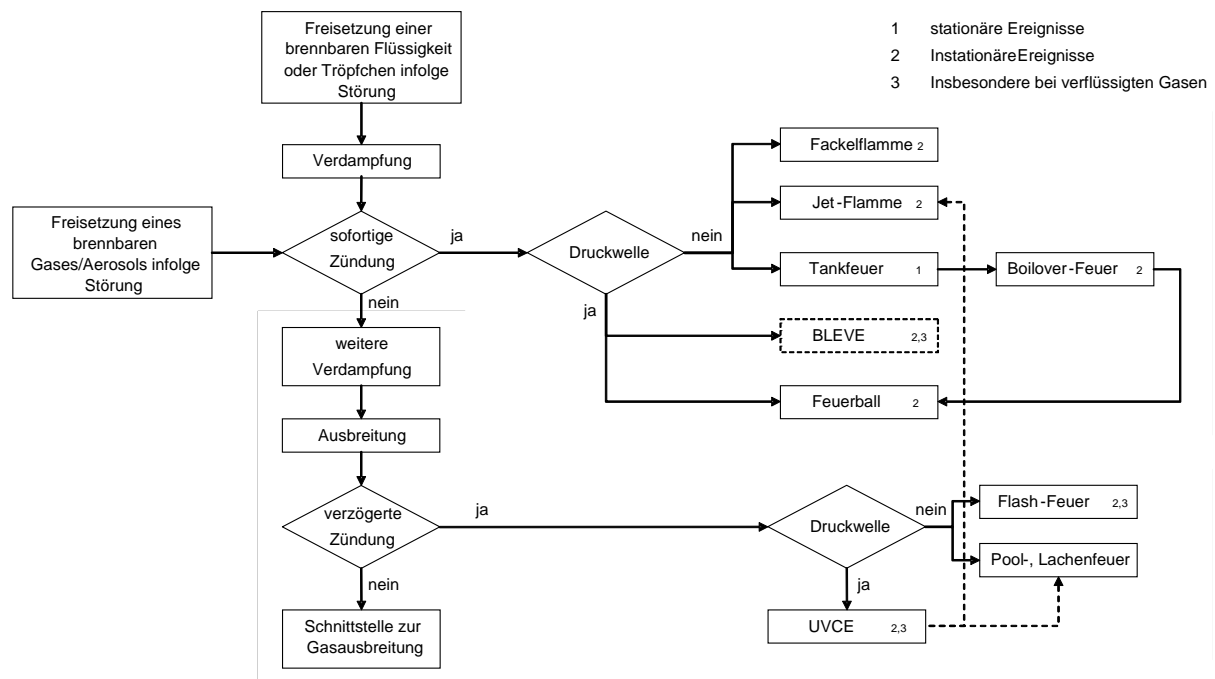


Abb. 2.1: Typen von gefährlichen Feuern infolge störungsbedingter Freisetzen brennbarer Flüssigkeiten und Gase/Aerosole [11]

### Poolfeuer, Lachenfeuer, Tankfeuer, Boilover-Feuer und multiple (Pool)-Feuer

Bei Poolfeuern (Abb. 2.3) [3, 12–16] handelt es sich um turbulente, nicht-vorgemischte Flammen, die über einem horizontalen Pool brennen. Aus dem Pool strömen brennbare Dämpfe mit einem sehr geringen Anfangsimpuls nach oben. Der Brennstoff, meist eine Flüssigkeit oder auch ein Feststoff, befindet sich innerhalb des Pools oder einer Auffangtasche, wodurch ein Poolfeuer eine Berandung aufweist. Ein Lachenfeuer entsteht durch Leckage oder Verschüttung einer brennbaren Flüssigkeit auf einer Oberfläche und weist daher keine Berandung auf. Befindet sich der brennbare Stoff in Behältern, z. B. Einzeltank, Tanklagern oder chemischen Reaktoren, spricht man von Tankfeuern. Eine besonders heftig verlaufende Form des Tankfeuers stellt das Boilover-Feuer dar [13]. Dabei befindet sich die brennbare Flüssigkeit über einer Schicht relativ niedrig siedender Flüssigkeit in einem Tank oder Behälter, wie es bei Wasserlinsen im Sumpf eines Lagertanks mit Rohöl oder durch den Einsatz von Löschwasser vorkommen kann. Durch spontane Verdampfung der niedrig siedenden Flüssigkeit, infolge einer vom darüber liegenden Tankfeuer gebildeten Wärmezone, werden große

Mengen aufschäumender, brennender Flüssigkeit heftig und plötzlich aus dem Tank ausgeworfen, was auch noch Stunden nach der Entzündung erfolgen kann. In neueren Untersuchungen zeigte sich eine intensive, durch thermische Strahlung dominierte Wechselwirkung zwischen mehreren gleichzeitig brennenden Feuern, sogenannten multiplen bzw. wechselwirkenden Feuern [6].



Abb. 2.2: Großbrand im Tanklager Buncefield Depot [4] bei London [17]: (a) Luftaufnahme des brennenden Tanklagers; (b) Satellitenaufnahme zeigt die Rauchausbreitung über Südengland

### Feuerball

Ein Feuerball (Abb. 2.3) entsteht durch Zündung einer Gaswolke aus einem brennbaren Dampf/Luft-Gemisch in Form einer instationären, turbulenten, nicht-vorgemisch-ten Flamme und geht meist mit einer ausgeprägten Druckwelle einher.

### Strahlflamme, Fackelflamme

Tritt die brennbare Flüssigkeit oder ein brennbares Gas(gemisch) mit einem großen Anfangsimpuls als Strahl in die Atmosphäre ein, z. B. bei großen Volumenströmen durch kleine Querschnitte, spricht man nach einer Zündung von einer Strahlflamme (Abb. 2.3). Erfolgt eine Freisetzung unter den gleichen Bedingungen in einem Kamin spricht man von Fackelflammen.

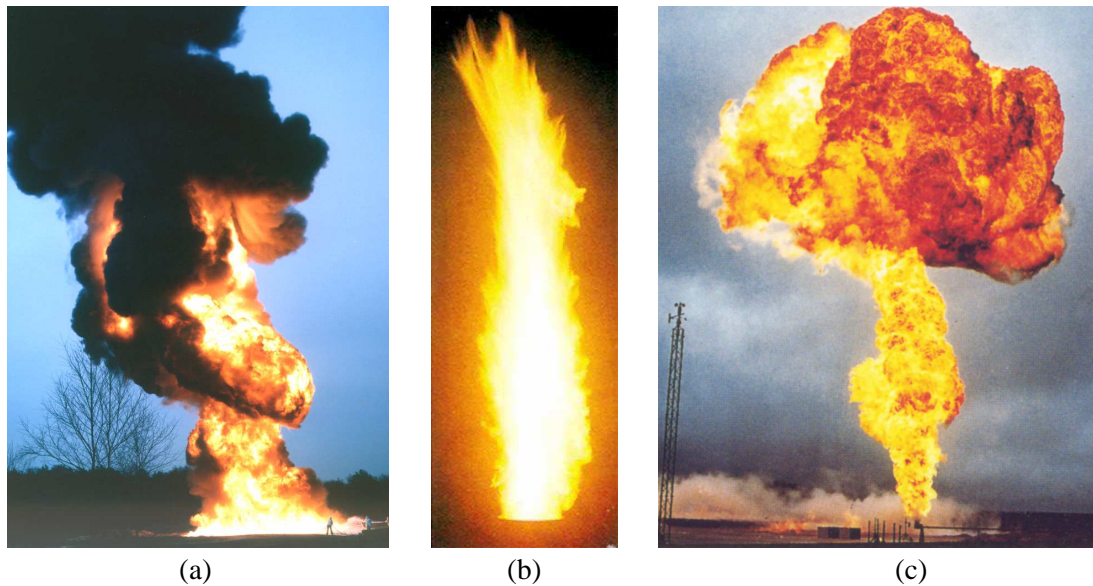


Abb. 2.3: Typen offener Feuer: (a) Kerosin-Poolflamme ( $d = 25 \text{ m}$ ) [18], (b) Strahlflamme [12], (c) Feuerball [12]

### UVCE, UVCF und BLEVE

Infolge einer Leckage kann sich eine brennbare Gas/Luft- bzw. Dampf/Luft-Gemischwolke bilden, die sich erst eine bestimmte Zeitdauer ausbreiten und vergrößern kann bevor sie zündet. Dieses kann eine atmosphärische Gaswolkenexplosion (UVCE, Unconfined Vapor Cloud Explosion) oder ein deflagrativ brennendes Gaswolkenfeuer (UVCF, Unconfined Vapor Cloud Fire) zur Folge haben. Durch thermische Strahlung eines benachbarten Feuers oder durch Versagen des Drucksystems kann es bei Flüssigkeiten nahe ihrem Siedepunkt zu einer heftigen Dampfspeisungsexplosion (BLEVE, Boiling Liquid Expanding Vapour Explosion) kommen, was mit einer intensiven Druckwelle mit Trümmerflug einhergehen kann [5].

## 2.3 Physikalische Vorgänge

Die wesentlichen physikalischen Vorgänge in einem Pool-, Lachen- und Tankfeuer sind in Abb. 2.4 dargestellt. Prinzipiell finden die folgenden Vorgänge statt:

1. Durch die Energiezufuhr in Form des Wärmerückstroms  $\bar{Q}_{\text{ba,tot}}$  verdampft der Brennstoff mit einer bestimmten Massenabbrandrate bei einem sehr geringen Anfangsimpuls, wobei zunächst kleine Wirbelstrukturen, so ge-

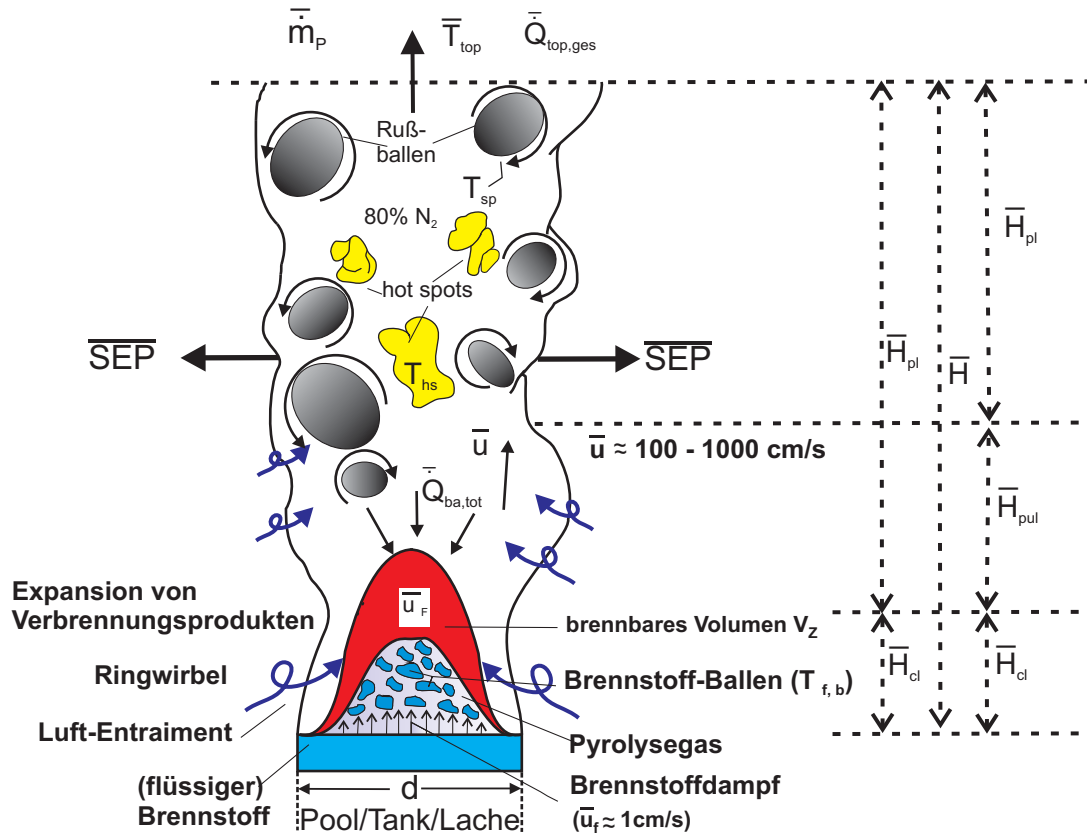


Abb. 2.4: Physikalische Vorgänge in Pool-, Lachen- und Tankfeuern sowie Klassifizierung der Flammenbereiche

nannte Brennstoffballen entstehen, die mit einströmender Umgebungsluft ein zündfähiges Volumen  $V_Z$  bilden.

2. Durch den Wärmerückstrom  $\bar{Q}_{ba,tot}$  wird das Brennstoff-Luft-Volumen  $V_Z$  gezündet, wobei die Verbrennungsprodukte stark expandieren und für eine kurze Zeit die Zufuhr von sauerstoffhaltiger Luft verhindern, wodurch kein neues zündfähiges Gemisch gebildet werden kann.
3. Bedingt durch den Auftrieb steigen die heißen Reaktionsprodukte unter Einschnürung der Flammenstruktur aufwärts, wobei es zu einer intensiven Luftansaugung kommt, was die erneute Bildung eines zündfähigen Gemisches zur Folge hat.
4. Das erneut entstandene zündfähige Volumen  $V_Z$  wird gezündet, wodurch sich die bisher beschriebenen Abläufe wiederholen. Dieser periodische

Ablauf wird als Pulsation oder Oszillation der Flamme bezeichnet.

Experimente zeigen, dass die Frequenz des Pulsierens weniger von der Art des Brennstoffs, als vielmehr durch den Pooldurchmesser und den Anfangsimpuls der Brennstoffdämpfe bestimmt ist [19–21].

Bei Poolflammen handelt es sich um frei brennende, turbulente, nicht-vorgemischte und auftriebsbestimmte Flammen, die einen sehr geringen Anfangsimpulsstrom des aufsteigenden Brennstoffdampfes aufweisen. Ein solches Feuer wird in zwei bis drei nicht kontinuierliche Flammenbereiche (Zonen) eingeteilt, deren Höhen sich mit zunehmendem Pooldurchmesser  $d$  ändern, was eine Berechnung bisher nur mit großer Unsicherheit möglich macht [3, 15, 22–24]. Der unterste Bereich der auftriebsbestimmten Flamme, die sogenannte klare Verbrennungszone (Länge  $\bar{H}_{cl}$  in Abb. 2.4), stellt bei großem Pooldurchmesser eine optisch dichte Schicht dar und ist meist nicht mit Ruß bedeckt. Hier kommt es zur maximalen, spezifischen Ausstrahlung  $SEP_{cl}^{ma}$  eines Feuers. Hier findet auch eine intensive Ansaugung von Umgebungsluft (Luftentrainment) statt, wodurch es zur Ausbildung von turbulenten Strömungen kommt, die für eine Verteilung der Umgebungsluft in die inneren Gebiete der Flamme sorgen. Innerhalb der klaren Verbrennungszone existiert eine brennstoffreiche Phase, die von einer sichtbaren, gelb leuchtenden Flammenzone umgeben ist. Hier findet eine vollständige Verbrennung zu den (Verbrennungs-)Produkten statt, infolgedessen die vertikale Strömungsgeschwindigkeit, ebenso wie die vertikalen Flüsse von Masse, Impuls und thermischer Energie, stark ansteigen. Unter Vermischung mit der angesaugten Umgebungsluft steigen diese Produkte weiter nach oben.

Der nächst höhere Bereich wird Pulsationszone (Länge  $\bar{H}_{pul}$  in Abb. 2.4) genannt. Die Verbrennung ist in dieser Zone weniger effizient und es kommt zu radialer und axialer Pulsation, infolge großskaliger Wirbel aus angesaugter Umgebungsluft. Ursächlich hierfür ist der Sauerstoffmangel des Feuers in Achsnähe, der eine interne Mischung der unverbrannten und der partiell verbrannten Flammengase aus der klaren Verbrennungszone zur Folge hat sowie die auftriebsbedingte Zirkulationsströmung. In der Pulsationszone beginnt die intermittierende Bildung von schwarzem Ruß, der das heiße Flammeninnere verdunkelt und im oberen Teil zur Akkumulation bedeutender Rußmengen führt. Ebenso wird die Bildung von Brennstoffballen beobachtet, so dass es zu einem nicht-kontinuierlichen Brennen der Flammgase kommt.

Der oberste Bereich, die Plumezone (Länge  $\bar{H}_{pl}$  in Abb. 2.4) oder auch Intermittenzbereich genannt, besteht aus einer nicht kontinuierlichen, segregierten Flamme aus statistisch verteilten, unregelmäßigen Ballen kleiner Brennstoffmengen. Es kommt zu einer Verminderung der thermischen Strahlung und zu

einer Abnahme der Temperatur, der axialen Strömungsgeschwindigkeit sowie der Spezieskonzentrationen, aufgrund der fortgesetzten Lufteinmischung.

Rußballen erscheinen als graue bis schwarze Wirbelstrukturen, wobei deren Anteil an der Flammenoberfläche stark vom Brennstoff und dem Pooldurchmesser abhängt. Bedingt durch die Abkühlung der heißen Rußpartikel durch Umgebungsluft bildet sich an der Flammenoberfläche eine Schicht relativ kalter, nicht-leuchtender Rußpartikel. Rußballen sind über ein kontinuierliches Spektrum stark absorbierende und emittierende Strukturen. Sie blockieren aber einen bedeutenden Teil der aus dem Flammeninneren ausgesandten Strahlung. Hiermit ist die Abnahme der flächenbezogenen Ausstrahlung der Flamme mit zunehmendem Pooldurchmesser zu erklären, da auch der Rußanteil mit steigendem Pooldurchmesser ansteigt.

Hot spots sind nach außen sichtbare Bereiche hoher Temperatur und Strahlungsintensität und können entstehen, wenn heiße Verbrennungsgase aus dem Flammeninneren, aufgrund ihrer hohen Geschwindigkeit die Rußschicht durchbrechen oder durch Verschiebung von Rußballen die Sicht auf einen Teil des Flammeninneren ermöglicht wird. Sie sorgen aufgrund ihrer hohen spezifischen Ausstrahlung, trotz geringer Lebensdauer, für kurzzeitige Strahlungsmaxima, welche eine besondere Gefahr darstellen.

Die Energiebilanz für das Bilanzgebiet I zwischen Plume/Flamme und Brennstoffballen in Abb. 2.5a) lässt sich formulieren als [15, 25]:

$$\bar{Q}_c = \bar{Q}_{a,rad} + \bar{Q}_{top} + \bar{\tau}_{fp} \bar{Q}_{ba,tot} + \bar{Q}_{verl} + \bar{Q}_{sen} \quad \text{mit} \quad (2.2)$$

$\bar{Q}_{ba,tot}$  nach Gl. 5.1,

$$\bar{Q}_c = \bar{q}_f'' A_P = \bar{m}_{f,max}'' A_P (-\Delta \bar{h}_{c,i}) \quad , \quad (2.3)$$

$$\bar{Q}_{top} = \bar{Q}_{conv} + \bar{A}_{top} \bar{SEP}^{ma} \quad , \quad (2.4)$$

$$\bar{e} = \bar{A}_{top}/A_P \quad \bar{A}_{top} \approx \bar{e} A_P \quad \text{und} \quad (2.5)$$

$$\bar{Q}_{conv} = \rho \bar{u}_{ax} \pi \bar{r}_{pl}^2 \bar{c}_{pl} (\bar{T}_{pl} - T_a) = \bar{u}_{ax} \pi \bar{r}_{pl}^2 \bar{c}_{pl} (\rho_a - \bar{\rho}_{pl}) T_a \quad , \quad (2.6)$$

oder näherungsweise :  $\bar{Q}_{\text{conv}} \lesssim 0.7 \bar{Q}_c$  . (2.7)

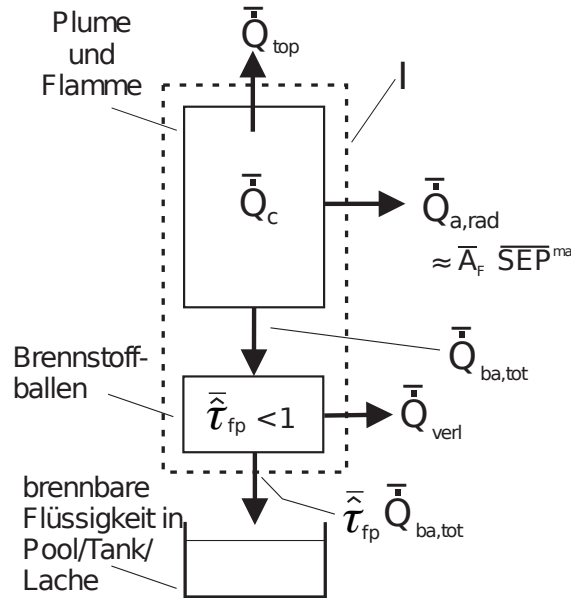


Abb. 2.5: Bilanzgebiet I zwischen Plume/Flamme und Brennstoffballen

Für die Energiebilanz im Bilanzgebiet II (in Abb. 2.6), zwischen der Flamme und den Brennstoffballen, gilt der Zusammenhang:

$$\bar{Q}_{ba,tot} = \hat{\tau}_{fp} \bar{Q}_{ba,tot} + \bar{Q}_{verl} \quad . \quad (2.8)$$

Unter Annahme von  $\hat{\tau}_{fp} = 1$  resultiert  $\bar{Q}_{verl} = 0$ .

Für die Energiebilanz an der Phasengrenze im Bilanzgebiet III (Energierückkopplungsmechanismus) zwischen Flüssigkeitsoberfläche und Brennstoffballen gilt:

$$\hat{\tau}_{fp} \bar{Q}_{ba,tot} + \bar{Q}_{in} = \bar{Q}_{f,ges} + \bar{Q}_{verl,wa} \quad , \quad (2.9)$$

mit

$$\bar{Q}_{f,ges} = \bar{Q}_v + \bar{Q}_{\Delta T} + \bar{Q}_{\lambda,f} \quad . \quad (2.10)$$

Es ist zu beachten, dass nur bei adiabatischen Poolflammen ( $\bar{Q}_{in} = 0$ ,  $\bar{Q}_{verl,wa} = 0$ ) die Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_a$  oder die Massenabbrandrate  $\bar{m}_f''$  alleine vom Wärmerückstrom,  $\bar{Q}_{ba,tot}$  zwischen Flamme und Flüssigkeitsoberfläche abhängig ist. Poolflammen von verflüssigten, kalten Gasen auf Land oder Wasser sind nicht-adiabatische Flammen und es muss ein zusätzlicher Wärmestrom zwischen Wasser- oder Landoberfläche und der Flüssigkeit des Pools mit einbezogen werden.

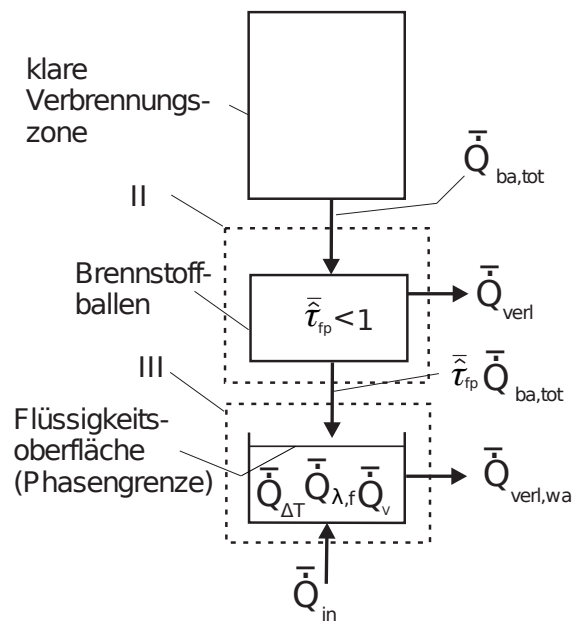


Abb. 2.6: Bilanzgebiet II zwischen der klaren Verbrennungszone und Brennstoffballen sowie Energiebilanz an der Phasengrenzfläche im Bilanzgebiet III zwischen Flüssigkeitsoberfläche und Brennstoffballen

## 2.4 Chemische Vorgänge

### 2.4.1 Organische Peroxide

Organische Peroxide sind organische Stoffe, die eine -O-O-Bindung enthalten und als Derivate des Wasserstoffperoxids, in welchem ein Wasserstoffatom oder beide Wasserstoffatome durch organische Reste ersetzt sind, angesehen werden können [26].

Als erstes organisches Peroxid wurde 1885 das Dibenzoylperoxide synthetisiert [27]. Seitdem wurden eine große Anzahl weiterer organischer Peroxide synthetisiert. Das industrielle Interesse an organischen Peroxiden begann im 20. Jahrhundert, wo Dibenzoylperoxid für die Öl- und Mehlbleiche genutzt wurde. Der zunehmende Bedarf an synthetischem Kautschuk und Kunststoff sowie der Einsatz als Initiator für viele Polymerisationsreaktionen steigerte den Bedarf an organischen Peroxiden kontinuierlich [28]. Zudem nehmen auch andere Anwendungen wie etwa der Einsatz z. B. in Waschmitteln („Aktivsauerstoff“) als Haftvermittler bei Polyethanbeschichtungen und zur der Selektivoxidation zu.



Organische Peroxide sind Derivate des Wasserstoffperoxids und lassen sich je nach Art der Substitution in verschiedene Stoffklassen unterteilen (Abb. 2.7):

Alkylhydroperoxide	$\text{R}-\text{O}-\text{O}-\text{H}$
Dialkylperoxide	$\text{R}^1-\text{O}-\text{O}-\text{R}^2$
Peroxycarbonsäuren	$\text{R}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{O}-\text{O}-\text{H}}{\text{C}}}$
Diacylperoxide	$\text{R}^1-\overset{\text{O}}{\underset{\text{O}-\text{O}}{\text{C}}}-\overset{\text{O}}{\underset{\text{O}-\text{O}}{\text{C}}}-\text{R}^2$
Peroxycarbonsäureester	$\text{R}^1-\overset{\text{O}}{\underset{\text{O}-\text{O}-\text{R}^2}{\text{C}}}$
$\alpha$ -Oxy-, $\alpha$ -Aminoperoxide	$\begin{array}{c} \text{R}^1 \quad \text{X} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{R}^2 \quad \text{O}-\text{O}-\text{R}^3(\text{H}) \end{array}$
$\text{X} = -\text{OH}, -\text{OR}^4, -\text{O}-\text{O}-$	
$-\text{NH}_2, -\text{NHR}^5$	
$-\text{NR}^5\text{R}^6$	

Abb. 2.7: Wichtige Stoffklassen organischer Peroxyverbindungen [28]

Die Reaktivität organischer Peroxide ist stark von der Molekülstruktur abhängig, wobei das Oxidationspotential stark in der Reihenfolge von den Peroxycarbonsäuren > Hydroperoxide > Diacylperoxide > Peroxycarbonsäureester > Dialkylperoxiden abnimmt [29]. Die Stabilität innerhalb der Stoffklassen nimmt mit steigender Zahl der Kohlenstoffatome oder der Möglichkeit der mesomeren Stabilisation zu.

Die Empfindlichkeit der Peroxyverbindungen gegen Wärme, Schlag, Stoß sowie Licht erfordern erhöhte Sicherheitsmaßnahmen, da mit heftigen Zersetzungsreaktionen bis hin zu Detonationen zu rechnen ist. Ein besonderes Problem stellen auch Verunreinigungen, insbesondere mit Schwermetallspuren dar, die ebenfalls explosionsartige Zersetzung hervorrufen. Als wichtige Größe für die thermische Stabilität organischer Peroxide dient die selbstbeschleunigende Zersetzungstemperatur (SADT)  $T_{\text{SADT}}$ . Die SADT wird als niedrigste Temperatur definiert, bei der eine selbstbeschleunigende Zersetzung eines Stoffes in der Verpackung, wie für die Beförderung benutzt, auftreten kann. Die SADT ist ein Wert des kombinierten Effektes der Umgebungstemperatur, der Zersetzungs kinetik, der Größe des Versandstückes und der Wärmeübertragungseigenschaften des Stoffes und seiner Verpackung. Die physikalischen und chemischen Eigenschaften zweier wichtiger organischer Peroxide sind in Tab. 2.1 aufgeführt.

Tab. 2.1: Physikalische Eigenschaften zweier wichtiger Peroxide [30–32]

Größe	DTBP	TBPB
$\rho_l$	790 kg/m <sup>3</sup>	1037 kg/m <sup>3</sup>
M	146.2 g/mol	194.2 g/mol
$T_{\text{bp}}$ bei 1 atm	383 K	-
LEL	0.74 vol.-%	0.5 vol.-%
UEL	100 vol.-%	100 vol.-%
untere Zündpunkte	545 K	438 K
obere Zündpunkte	758 K	793 K
$T_{\text{SADT}}$	358 K	338 K
$T_{\text{onset}}$	379 K	364 K
$\Delta h_c$	36000 kJ/kg	30113 kJ/kg
$\Delta h_v$	212 kJ/kg	202 kJ/kg

### Alkylhydroperoxide

Feste und flüssige Hydroperoxide sind in reiner Form gewöhnlich stabil genug, um sie bei Temperaturen von 80 °C destillieren oder schmelzen zu können [28]. Die thermische Stabilität von Hydroperoxiden wird durch die Dissociationsenergie der O-O-Bindung bestimmt, wobei für die unimolekulare Zerfallsreaktion ein Richtwert von 180 - 184 kJ/mol angenommen werden kann. Alkylhydroperoxide

sind stärkere Säuren ( $11.5 < \text{pK}_s < 13$ ) als ihre korrespondierenden Alkohole, so dass die Salzbildung zur Isolierung und Reinigung genutzt werden kann [29].

Alkylhydroperoxide können unter Erhalt der -O-O-Bindung in eine Vielzahl von Verbindungen wie Dialkylperoxide, Peroxycarbonsäureester, etc. umgesetzt werden und bilden eine wichtige Zwischenstufe. Die Herstellung ist über die Autoxidation mit Sauerstoff, wie beim Cumolhydroperoxid, möglich. Des Weiteren ist eine Alkylierung von Wasserstoffperoxid möglich, welche aber zumeist wenig selektiv ist, da eine weitere Alkylierung zum Dialkylperoxid stattfindet. Technische Bedeutung haben nur die Peroxidierungen zu den stabilen tertiären Hydroperoxiden, z. B. aus tert-Butanol erlangt [28].

### Dialkylperoxide

Dialkylperoxid werden in primäre, sekundäre und tertiäre sowie in symmetrische ( $R' = R$ ) und unsymmetrische Peroxide ( $R' \neq R$ ) unterschieden [28]. Zu technischer Bedeutung sind aber nur die tertiären Vertreter gekommen und gehören zu den stabilsten handelsüblichen Peroxiden und können aufgrund ihrer Stabilität bei Normaldruck (Di-tert-butylperoxid; DTBP) oder im Vakuum (Dicumylperoxid) destilliert werden. Die Dissoziationsenergie für die -O-O-Bindung liegt im Bereich zwischen 170 - 180 kJ/mol [33]. Die Zersetzung von DTBP in der Gasphase führt bei Temperaturen  $400 \text{ K} < T < 570 \text{ K}$  hauptsächlich zu Aceton und Ethan [34].

Die Produktion von Dialkylperoxiden über die Autoxidation mit Sauerstoff ist nur im Falle stabiler intermediär entstehender Radikale möglich, wie z. B. die Herstellung von Ascaridol über eine Autoxidation von  $\alpha$ -Terpinen [35]. Zudem ist eine Alkylierung von Wasserstoffperoxid grundsätzlich möglich. Verfahrenstechnisch hat sich die Alkylierung von Hydroperoxiden durchgesetzt.

### Peroxycarbonsäureester

Peroxyester lassen sich in verschiedene Gruppen (z. B. Alkylperoxyester von Carbonsäuren, Peroxysulfonsäureester, etc.) unterteilen [28]. Peroxyester können aufgrund ihrer thermischen Stabilität nur sehr schonend destilliert, umkristallisiert oder durch Chromatographie gereinigt werden. Der zerfallbestimmende Schritt ist die Dissoziation der -O-O-Bindung, die zwischen 147 - 164 kJ/mol liegt [33, 36]. Zusätzlich zeigen Peroxyester, wie das tert-Butylperoxybenzoat (TBPB) eine charakteristische Carbonylbande bei 1747 - 1820  $\text{cm}^{-1}$ . Bei thermischer Homolyse kann es sowohl zu einfacher Homolyse, häufig gefolgt durch eine Decarboxylierung sowie einem simultanen Bruch der -O-O und -C-R-Bindung,

kommen [37–39]. Welcher Mechanismus zutrifft, wird dabei durch die Stabilität der entstehenden Radikale und Temperatur bestimmt. Peroxyester können aber auch ionisch zersetzt werden, wobei mit Umlagerungsprodukten zu rechnen ist [40]. Peroxyester können nicht direkt aus der Peroxysäure mit Alkoholen synthetisiert werden. Die Autoxidationsreaktionen haben keinen Einfluss. Peroxyester werden daher durch Umsetzung von Hydroperoxiden mit Carbonsäuren, Carbonsäurechloriden, -anhydriden und N-Acylimidazolen hergestellt.

### 2.4.2 Rußbildung

Die Entstehung oder Bildung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen, polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) und Ruß haben einen signifikanten Einfluss auf die charakteristischen Eigenschaften großer Poolfeuer.

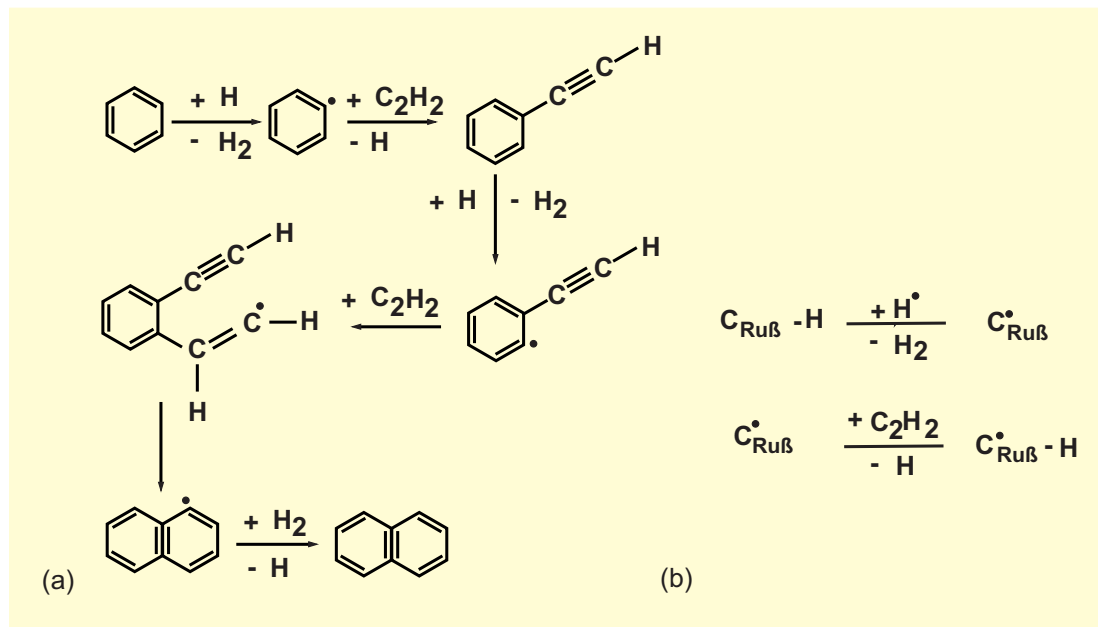


Abb. 2.8: (a) Wasserstoffabstraktions- und Kohlenstoffadditions (HACA)-Mechanismus beim planaren PAK-Wachstum und (b) Erweiterung auf das Oberflächenwachstum der Rußpartikel nach Bockhorn [41]

Findet keine Flammenlöschung statt, wird der Brennstoff in kleine Kohlenwasserstoff-Bausteine (C<sub>1</sub> - C<sub>2</sub>) abgebaut und anschließend wieder aufgebaut. Die polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (PAK) sind dabei eine wichtige Stoffklasse [8]. Als deren wichtigstes Vorläuferprodukt gilt das Ethin (Acetylen), das insbesondere in brennstoffreichen Flammen in recht hoher Konzentration gebildet wird. Zum Aufbau der PAKs wird der Elementarreaktions-Mechanismus

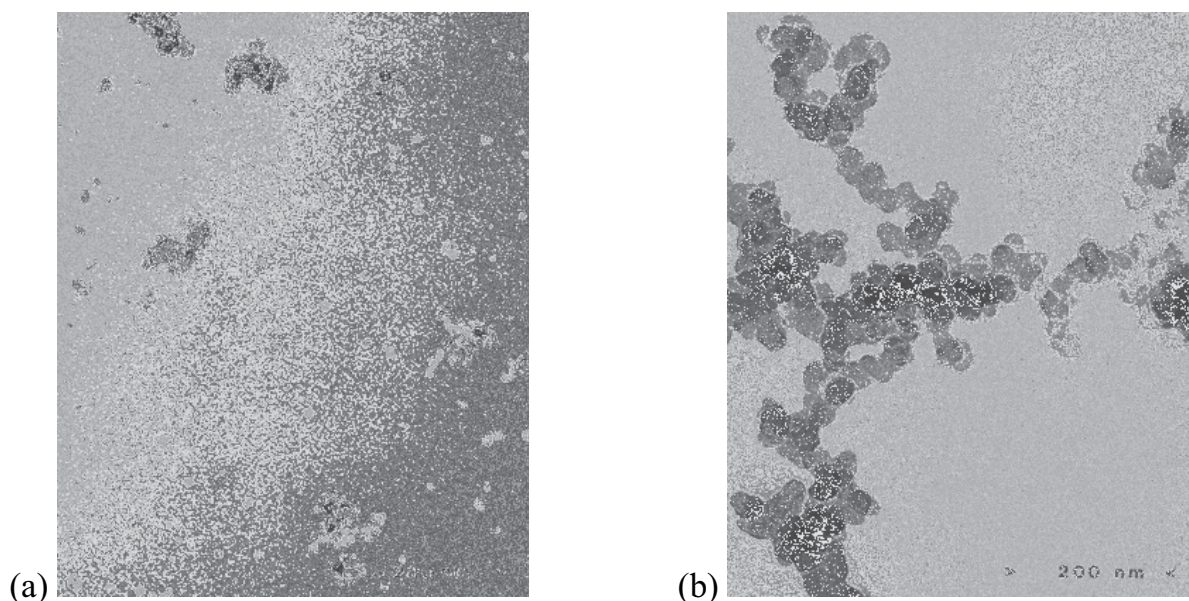


Abb. 2.9: Elektronenmikroskopische Aufnahmen der Rußpartikel in einer Ethanflamme im unteren (a) bzw. im oberen (b) Flammenbereich [42]

in Abb. 2.8, mit Acetylen als Wachstumsspezies vorgeschlagen, der mit der Addition von Acetylen an ein Phenylradikal startet. Am entstehenden Styryl-Radikal kommt es nach dem Angriff eines zweiten Acetylens zu einem Ringschluss zum Naphthalin. Durch weitere Anlagerung von Acetylen können polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe entstehen [41]. Die Bildung von Ruß (Abb. 2.9) geht auf das weitere Wachstum der PAKs zurück. Im ersten Schritt kommt es durch Zusammenlagern von Molekülen zur Keimbildung, welche ab einer Molekülgröße von 500 a.m.u. möglich scheint. Da ab hier die intermolekularen Anziehungskräfte groß genug sind, um ein Zusammenlagern der PAK-Moleküle zu ermöglichen. Der weitere Aufbau erfolgt anschließend durch Oberflächenwachstum (Addition von Acetylen) sowie durch Koagulation [41, 43]. Der überwiegende Teil des Rußes (> 95 %) wird aber durch Oberflächenwachstum gebildet, wobei es sich um einen komplizierten Prozess handelt, da es sich nicht um eine Gasphasenreaktion handelt, sondern um einen heterogenen Prozess, wobei auch Adsorptions- und Desorptionsprozesse an der Oberfläche berücksichtigt werden müssen.

Die Koagulation hingegen findet nur bei relativ kleinen Partikeln statt, die durch große Wachstumsgeschwindigkeiten charakterisiert werden können. Die Koagulation ist ein Haftprozess bei dem die Partikel über eine gemeinsame äußere Schale miteinander verknüpft sind. In der späteren Phase der Rußbildung kommt es zu Ruß-Agglomeration, wenn es wegen des Fehlens von

Oberflächenwachstum zur Bildung von locker strukturierten Aggregaten kommt. Bei nicht-vorgemischten Flammen spielt die Rußoxidation eine wichtige Rolle, die erst nach dem Zusammentreffen mit Sauerstoff beginnt.

## 2.5 Lachengröße bzw. Lachendurchmesser

### Kontinuierliche Freisetzung

Kommt es bei einer kontinuierlichen Freisetzung brennbarer Flüssigkeiten zu einer schnellen Entzündung kann der Pooldurchmesser im Gleichgewicht  $d_e$  wie folgt berechnet werden [14, 15, 44, 45]:

$$d_e = 2 \sqrt{\frac{\bar{V}_{rf}}{\pi \bar{v}_a}}, \quad (2.11)$$

Ist die flächenbezogene Verschüttungsrate  $\frac{4\bar{V}_{rf}}{\pi d_e^2}$  gleich der Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_a$ , dann ist die laterale Ausbreitung der Flüssigkeit beendet und das Poolfeuer erreicht bei andauernder Freisetzung einen stationären Zustand. Dabei ist zu beachten, dass es sich um eine ebene und glatte Brennstoffoberfläche, ohne Perkolation durch den Boden oder Teillöslichkeit in Wasser, handeln muss und der dominierende Wärmetransport zur Poolflüssigkeit durch die Flamme erfolgt, wobei  $\bar{v}_a = \text{const}$  (zutreffend für alle flüssigen Kohlenwasserstoffe mit  $t_{bp} > T_a$ ) sein muss. Eine weiterer Voraussetzung ist ein zeitlich konstanter Wärmeübergang vom Untergrund auf die Poolflüssigkeit, was z. B. für LNG auf Wasser zwar zutreffend, aber für LNG auf Land nicht zutreffend ist, da hier der Wärmeübergang mit zunehmender Zeit abnimmt.

Der stationäre Durchmesser  $\bar{d}_e$  wird innerhalb der Zeit  $t_e$  erreicht:

$$t_e = 0.564 \frac{\bar{d}_e}{\sqrt[3]{g_{\text{eff}} \bar{v}_a \bar{d}_e}} \quad \text{mit} \quad (2.12)$$

$$g_{\text{eff}} = g \frac{(1 - \rho_f)}{\rho_{\text{H}_2\text{O}}} \quad \text{auf Wasser} \quad \text{oder} \quad g_{\text{eff}} = g \quad \text{auf Land} \quad (2.13)$$

### Momentane Freisetzung

Bei einer momentanen Freisetzung wird innerhalb der Zeit  $t_{\text{max}}$  ein maximaler Durchmesser  $d_{\text{max}}$  des Feuers erreicht. Hierfür gilt der Zusammenhang [15, 44–46]:

$$\left( \frac{d(t)}{\bar{d}_{\text{max}}} \right)^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \left( \frac{t}{t_{\text{max}}} \right) \left[ 1 + \left( \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) \left( \frac{t}{t_{\text{max}}} \right)^2 \right] \quad \text{mit} \quad (2.14)$$

$$t_{\max} = 0.6743(V_f(\bar{v}_a^2 g_{\text{eff}}))^{\frac{1}{4}} \quad \text{und} \quad \bar{d}_{\max} = 2(V_f^3 \frac{g_{\text{eff}}}{\bar{v}_a^2})^{\frac{1}{8}}. \quad (2.15)$$

Da sich ein Lachenfeuer in seinem Durchmesser  $d$  verändert, bis es eine Barriere erreicht oder der gesamte Brennstoff verbraucht ist, existiert  $d_{\max}$  nur sehr kurz, so dass es sich um eine konservative Berechnung handelt. Eine zeitlich gemittelter Durchmesser  $\bar{d}$  führt zu einer besseren Abschätzung der Bestrahlungsstärke  $\bar{E}$  außerhalb der Flamme, wobei aber das Gefahrenpotential durch erhöhte thermische Strahlung in späteren Stadien des Feuers vernachlässigt wird:

$$\bar{d} = \frac{1}{t_{\max}} \int_0^{t_{\max}} d(t) dt, \quad (2.16)$$

## 2.6 Abbrandgeschwindigkeit

Die Abbrandgeschwindigkeit  $v_a$  ist eine fundamentale Schlüsselgröße zum Verständnis eines Poolfeuers. Pionierarbeit auf dem Gebiet des Abbrandverhaltens von Poolfeuern lieferten Blinov und Khudiakov (s. Abb. 2.10), die zuerst systematisch die Abhängigkeit von Brennstoff und Pooldurchmesser untersuchten [47]. Nach Hottel ist die Abbrandgeschwindigkeit entsprechend Gln. 2.9 - 2.10 für  $\bar{Q}_{\lambda,f} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{\text{sen}} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{\text{verl,wa}} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{\text{ba},\alpha} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{\text{ba},\lambda} \rightarrow 0$ , wie folgt bestimmt [15, 48]:

$$v_a(d, f, t, u_w, (-\Delta h_c)/\Delta h_v) = \frac{\bar{Q}_{\text{ba,rad}}(d, f, t, (-\Delta h_c), u_w)}{A_p \rho_f (\Delta h_v + \bar{c}_{p,f} (T_{f,bp} - T_{f,a}))}. \quad (2.17)$$

Dabei ist zu beachten, dass die Einstrahlzahl  $\varphi$  zwischen Flamme und Pooloberfläche als konstant angenommen wird. Zudem ist Gl. 2.17 nur unter windstillen Bedingungen sowie bei adiabatischen Poolfeuern gültig. Für nicht-adiabatische Poolfeuer ist die Ergänzung spezieller Therme notwendig [22]. Eine Berechnung von  $\bar{Q}_{\text{ba,rad}}$  ist nach Werthenbach oder nach Hertzberg möglich [49–51].

Die Abbrandgeschwindigkeit  $v_a$  zeigt für alle untersuchten Brennstoffe eine ähnliche Abhängigkeit vom Pooldurchmesser  $d$ , welche relativ gut untersucht ist und für die näherungsweise gilt [52]:

$$\bar{v}_a(d) = \bar{v}_{a,\max} (1 - e^{-k\beta d}) \quad , \quad \text{für} \quad 0.4 \text{ cm} < d < 3000 \text{ cm} \quad (2.18)$$

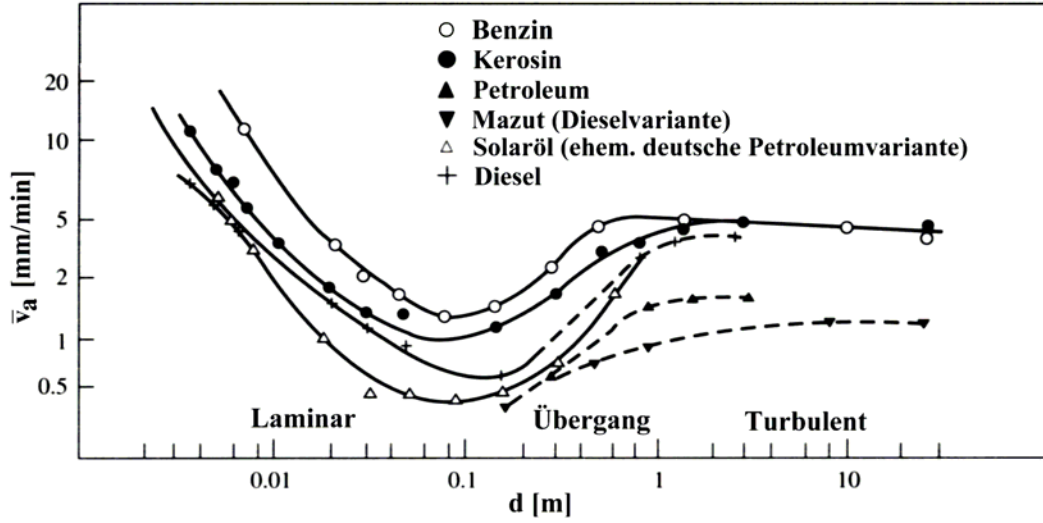


Abb. 2.10: Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_a$  als Funktion des Pooldurchmessers  $d$  für verschiedene Brennstoffe [47, 48]

Dabei kann die maximale Abbrandrate  $\bar{v}_{a,\max}$  unter der Annahme berechnet werden, dass kein Brennstoff extern zugeführt wird [53]:

$$\bar{v}_{a,\max} = 1.27 \cdot 10^{-6} \left( \frac{-\Delta h_{c,i}}{\Delta h_{v,i}} \right) \quad \text{für } d \gtrsim 1 \text{ m} \quad . \quad (2.19)$$

Die Gl. 2.19 ist gültig für  $i = \text{Methanol, H}_2(\text{l}), \text{LNG, Butan, Hexan, Benzol und Xylol}$ .

Für die maximale Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_{a,\max}$  von Flüssigkeitsgemischen gilt [53]:

$$\bar{v}_{a,\max} = 1.27 \cdot 10^{-6} \frac{\sum_i (-\Delta h_{c,i})}{\sum \tilde{y}_i \Delta h_{v,i} + \sum \tilde{x}_i \int_{T_{f,a}}^{T_{f,b}} \bar{c}_p(T) dt} \quad , \quad (2.20)$$

oder näherungsweise für  $(-\Delta h_{c,i}) \approx \Delta h_{v,i}$  und  $\tilde{y}_i > \tilde{x}_i$ :

$$\bar{v}_{a,\max} = \sum \tilde{y}_i \bar{v}_{a,i} \quad . \quad (2.21)$$



Liegen Gemische vor bei denen die Flüchtigkeit der Komponenten  $i$  weit auseinander liegt ist davon auszugehen, dass eine zeitabhängige Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_a(t)$  vorliegt, wobei  $\bar{v}_a$  zu Beginn durch die leichter flüchtige Komponente  $i$ , in der Endphase der Verbrennung durch die höher siedende Fraktion, bestimmt wird. Die Gl. 2.20 basiert dabei auf der experimentellen Untersuchung von Gemischen bestehend aus unsymmetrischen Dimethyl-Hydrazonen (UDMH) und Diethylaminen (DETA) und geben eine gute Abschätzung von  $\bar{v}_{a,\max}$  ab, auch wenn die Siedepunkte der Komponenten weit auseinander liegen.

## 2.7 Massenabbrandrate

Eine weitere Schlüsselgröße ist die Massenabbrandrate  $\bar{m}_f''$  (Abb. 2.11) für die die folgende Zahlenwertgleichung gilt [15, 52]:

$$\bar{m}_{f,\max}'' = \frac{\bar{m}_f''}{A_P} = \frac{10^{-3} (-\Delta h_{c,i})}{\Delta h_v + c_{p,v} T_{f,bp} - c_{p,f} T_{f,a}} \quad . \quad (2.22)$$

Gl. 2.22 ist für viele Einzelkomponenten (Butan, Hexan, Benzin, JP-4, Methanol, Aceton, Benzol, Xylol, LNG, LPG, LEG) eines adiabatischen Feuers unter Umgebungsbedingungen gültig.

Wenn  $\bar{m}_{f,\max}''$  vorliegt ist die Abhängigkeit der Massenabbrandrate als Funktion des Pooldurchmessers gegeben durch [52–54]:

$$\bar{m}_f''(d) = \bar{m}_{f,\max}''(1 - e^{-k\beta d}) = \bar{m}_{f,\max}'' \epsilon_F \quad . \quad (2.23)$$

Als effektiver Emissionsgrad der Flamme, kann bei Poolfeuern mit  $d > 1$  m der Wert  $\epsilon_F \approx 0.95$  genutzt werden. Für  $d \rightarrow \infty$  erhält man somit  $\bar{m}_{f,\max}'' = \bar{m}_f''$ . Die bedeutenste Größe in Gl. 2.23 ist die maximale Massenabbrandrate  $\bar{m}_{f,\max}''$ , da sie im Falle unfallbedingter Poolfeuer ein Maß für die Verbrennungsgeschwindigkeit ist.

Für brennbare Flüssigkeitsgemische gilt:

$$\bar{m}_{f,\max}'' = \rho_f \bar{v}_{a,\max} \approx 1 \cdot 10^{-3} \frac{\sum \tilde{y}_i (-\Delta h_{c,i})}{\sum \tilde{y}_i \Delta h_{v,i} + \sum \tilde{x}_i \int_{T_{f,a}}^{T_{f,b}} \bar{c}_p(t) dT} \quad . \quad (2.24)$$

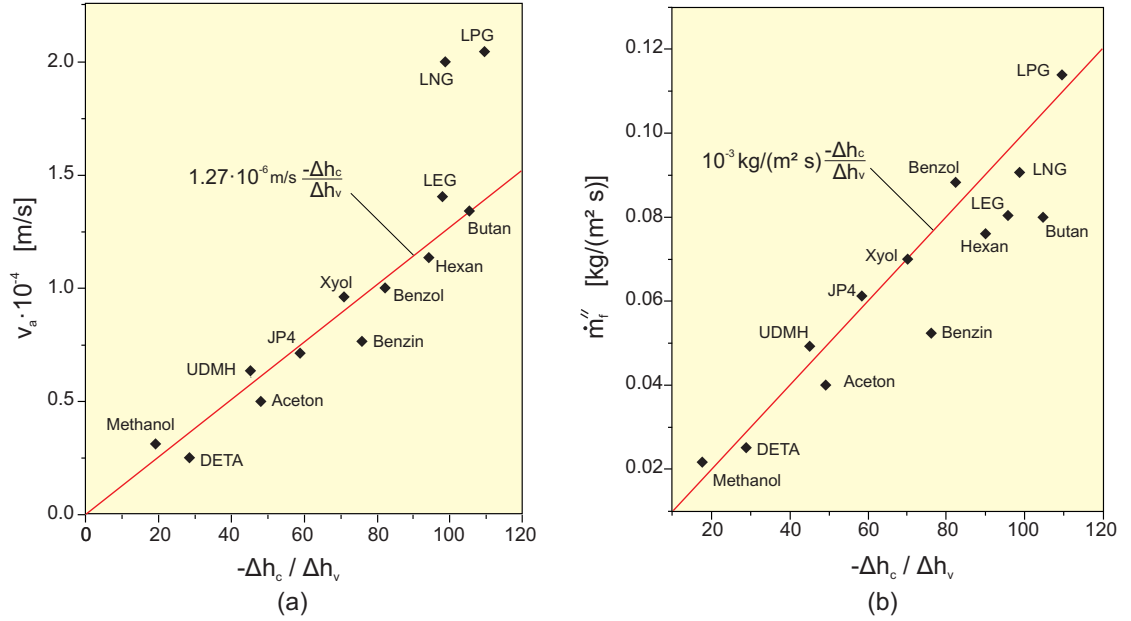


Abb. 2.11: Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_a$ ; (a) und Massenabbrandrate  $\bar{m}''_f$ ; (b) als Funktion der thermodynamischen Eigenschaften [44]

## 2.8 Flammenlänge

Eine Definition von Flammenlängen gestaltet sich schwierig. Daher  $u_w^*$  sollte als zweckmäßiges Kriterium die Intermittenz herangezogen werden [55]. Für die grundsätzliche Beschreibung zeitabhängiger Flammenformen auch bei Windeinfluss werden näherungsweise die in Abb. 2.12 gezeigten Poolfeuer-Geometrien verwendet [14].

Die zeitlich gemittelte, dimensionslose Flammenlänge  $\bar{H}/d$  als auch die maximale sichtbare Flammenlänge  $(H/d)_{\max}$  kann als Funktion der Verbrennungs-Froude-Zahl sowie der dimensionslosen Windgeschwindigkeit  $\bar{u}_w^*$  ausgedrückt werden [15]:

$$\bar{H}/d = a \text{Fr}_f^b \bar{u}_c^{*c} \quad \text{und} \quad (H/d)_{\max} = a \text{Fr}_f^b \bar{u}_c^{*c}, \quad (2.25)$$

mit der dimensionslosen Windgeschwindigkeit:

$$\bar{u}_w^* = \frac{\bar{u}_w}{\bar{u}_c} \quad \text{oder} \quad \bar{u}_w^*(10) \equiv \frac{\bar{u}_w(10\text{m})}{\bar{u}_c}, \quad (2.26)$$

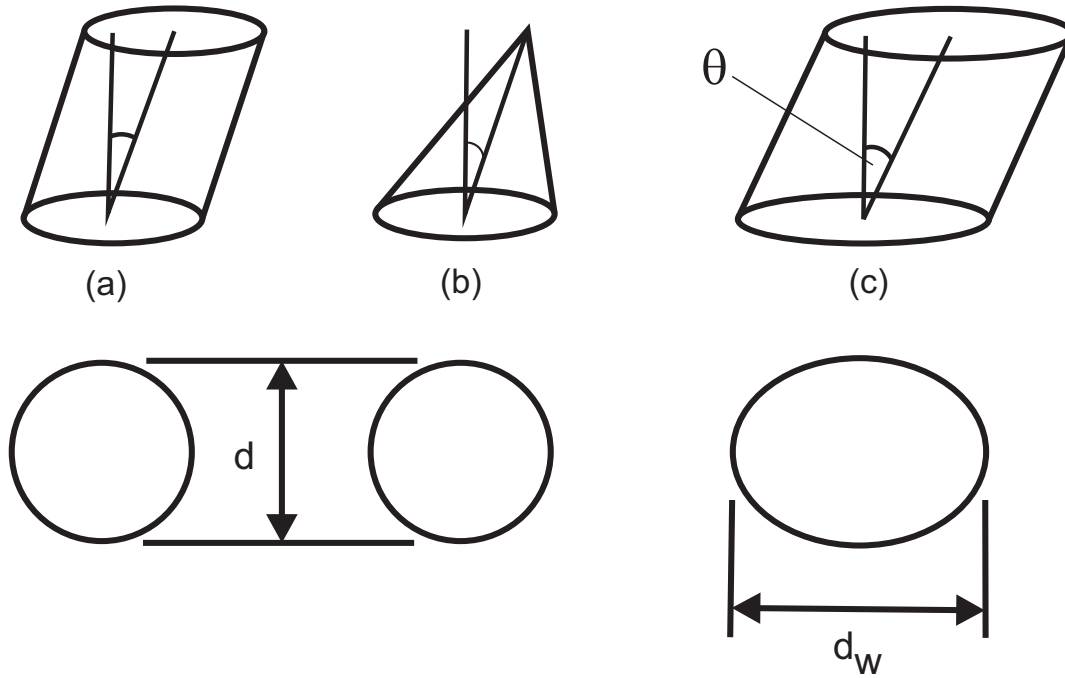


Abb. 2.12: (a) geneigte zylindrische Flamme; (b) geneigte konische Flamme; (c) geneigte zylindrische Flamme mit verlängertem Flammbasisdurchmesser  $d_w$

mit  $\bar{u}_c$ :

$$\bar{u}_c = \left( \frac{g \dot{m}_f'' d}{\rho_v} \right) \approx \left( \frac{g \dot{m}_f'' d}{\rho_a} \right) \quad (2.27)$$

Für Poolfeuer werden in der Literatur die Korrelationen in Tab. 2.2 angegeben.

Zu erwähnen ist außerdem noch die aus Daten im Labormaßstab hergeleitete, aber für einen breiten Bereich von Brennstoffen gültige Heskestad-Korrelation [62]:

$$\frac{H}{d} = -1.02 + 3.7 Q^*{}^{\frac{2}{5}} \quad , \quad (2.28)$$

mit

$$Q^* = \frac{\dot{Q}_{\text{ges}}^*}{\rho_a c_{p,f} T_a d^2 \sqrt{g d}} \quad . \quad (2.29)$$

Tab. 2.2: Wichtige empirische Korrelationen zur Abschätzung der mittleren und maximalen dimensionslosen Flammenlängen nach Gl. 2.25

Korrelationen	a	b	c	Bemerkungen
Thomas 1	46	0.61	0	Holzgitterfeuer; $\bar{H}/d$ ; [56]
Thomas 2	55	0.67	-0.21	Holzgitterfeuer; $(H/d)_{\max}$ ; [56]
Moorhouse 1	6.2	0.25	-0.04	zyl. LNG-Poolfeuer; $(H/d)_{\max}$ ; [57]
Moorhouse 2	4.7	0.21	-0.11	kon. LNG-Poolfeuer; $(H/d)_{\max}$ ; [57]
AGA	1.0	-0.19	0.06	LNG-Poolfeuer; $(H/d)_{\max}$ ; [58]
Mangialavori und Rubino	1.0	-0.19	0.06	LNG-Poolfeuer; $(H/d)_{\max}$ ; [59]
Pritchard und Binding	10.6	-0.31	-0.03	LNG-Poolfeuer; $(H/d)_{\max}$ ; [60]
Muños 1	7.74	-0.38	-0.10	Benzin-Poolfeuer; $\bar{H}/d$ ; [61]
Muños 2	8.44	-0.30	0.13	KW-Poolfeuer; $(H/d)_{\max}$ ; [61]

Die Flammenlängen-Korrelationen für die maximalen sichtbaren Flammenlängen  $(H/d)_{\max}$  treffen eine bessere Vorhersage, als die für die zeitlich-gemittelten sichtbaren Flammenlängen  $\bar{H}/d$ .

Eine weitere wichtige Größe ist die Länge  $\bar{H}_{cl}$  der klaren Verbrennungszone, die sich von der Pooloberfläche ( $x = 0$ ) bis zu einer Höhe ( $x = \bar{H}_{cl}$ ) erstreckt in welcher fast der gesamte Brennstoff umgesetzt wird, was zu einer maximalen spezifischen Ausstrahlung  $\overline{SEP}^{ma}$  des Feuers führt. Auf Messungen an LNG-Feuern basiert die folgende Korrelation in Abhängigkeit der Brennstoff-Froude-Zahl [23]:

$$\frac{\bar{H}_{cl}(d)}{\bar{H}(d)} = 0.75 + \log_{10}(\overline{Fr}_f)^{\frac{1}{4}} \quad . \quad (2.30)$$

Zusätzlich existieren Korrelationen, die auch die Art des Brennstoffs berücksichtigen [63]:

$$\frac{\bar{H}_{cl}(d)}{\bar{H}(d)} = 11.404 Fr_f^{1.13} \bar{u}_w^* \left( \frac{C}{H} \right)^{-2.49} \quad . \quad (2.31)$$

Des Weiteren ist eine Abschätzung der Pulsationszone  $\bar{H}_{\text{pul}}$  und der Plumezone  $\bar{H}_{\text{pl}}$  notwendig [64]:

$$\bar{H}_{\text{cl}} \approx 0.1 \bar{H}, \quad 0.1 \bar{H} \lesssim \bar{H}_{\text{pul}} \lesssim 0.4 \bar{H} \quad , \quad (2.32)$$

$$\frac{\bar{H}_{\text{pl}}}{\bar{H}} = 0.167 - \log_{10} \left( \text{Fr}_f^{\frac{1}{4}} \right) \quad \text{für} \quad 7.4 \cdot 10^{-4} < \text{Fr}_f < 2.5 \cdot 10^{-1} \quad . \quad (2.33)$$

## 2.9 Flammenneigungswinkel

Durch Windeinfluss werden Flammen, wie in Abb. 2.13 gezeigt, von der Flammenachse leewärts abgelenkt. Durch Abschätzung des zeitlich gemittelten Flam-

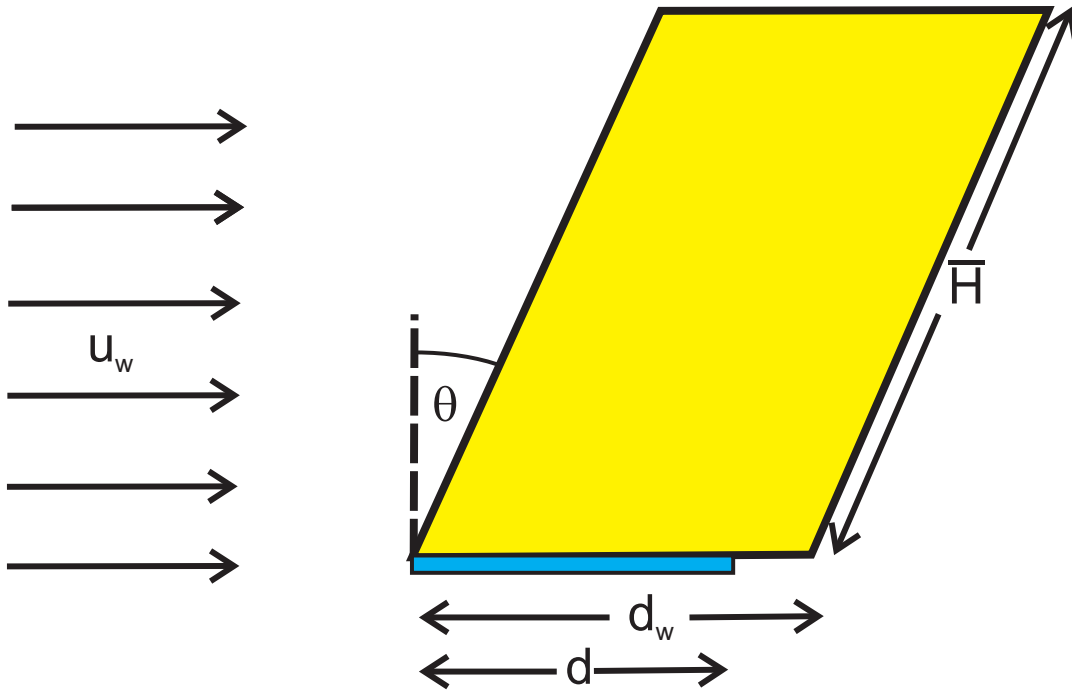


Abb. 2.13: Windeinfluss auf eine Flamme

menneigungswinkels  $\bar{\Theta}$  existieren zwei unterschiedliche Korrelationstypen, welche in Tab. 2.3 als  $\bar{\Theta}(\bar{u})$  zusammengestellt sind [15]:

$$\cos \Theta = a_1 (\bar{u}_w^*)^{b_1} \quad , \quad \text{für} \quad \bar{u}_w^* \geq 1 \quad , \quad (2.34)$$

$$\cos \Theta = 1 \quad , \quad \text{für} \quad \bar{u}_w^* < 1 \quad . \quad (2.35)$$

Tab. 2.3: Empirische Korrelationen zur Abschätzung des mittleren Flammenneigungswinkels  $\Theta$  nach Gln. 2.34 - 2.36

Korrelationen	$a_1$	$b_1$	$c_1$	$d_1$	$e_1$	Bemerkungen
AGA	1	-0.5				LNG-Poolfeuer [58]
Moorhouse 1	0.86	0.25				zyl. LNG-Poolfeuer; [57]
Moorhouse 2			0.7	0.43	0.11	zyl. LNG-Poolfeuer; [57]
Johnson			0.7	0.43	0.11	[65]
Pritchard und Binding			0.67	0.33	-0.18	LNG-Poolfeuer; [60]
Rew und Hulbert			3.13	0.43	0	[65]
Muños 1	0.96	-0.26				KW-Poolfeuer [61]

sowie als  $\bar{\Theta}(\text{Fr}_w, \text{Re}_w)$

$$\frac{\tan \bar{\Theta}}{\cos \bar{\Theta}} = c_1 \text{Fr}_w^{d_1} \text{Re}_w^{e_1} \quad . \quad (2.36)$$

Da die Flamme sehr instabil und nicht ständig in Windrichtung geneigt ist, ist auch der Flammenneigungswinkel  $\Theta$  sehr empfindlich gegenüber kleinen Windgeschwindigkeiten ( $\text{Fr}_w \ll 0.2$  bzw.  $\bar{u}_w^* < 1$ ), wohingegen der Flammenneigungswinkel  $\Theta$  gegenüber höheren Windgeschwindigkeiten ( $\text{Fr}_w \gg 0.2$  bzw.  $\bar{u}_w^* \geq 1$ ) unempfindlich ist. Bei experimentellen Messungen bei kleinen Windgeschwindigkeiten wurde ein Flammenneigungswinkel von  $\bar{\Theta} \approx 15^\circ$  gefunden, was mit der Moorhouse-Korrelation am besten übereinstimmt [61]. Die Gln. 2.34 - 2.36 haben allerdings den Nachteil, dass der Flammenneigungswinkel  $\Theta$  für kleine Windgeschwindigkeiten  $\bar{\Theta} = 0^\circ$  wäre. Die Korrelation Gl. 2.36 ist dagegen für Flammen bei höheren Windgeschwindigkeiten ermittelt worden. Daher ist aber ihre Anwendung auf geringe Windgeschwindigkeiten eher ungenau.

## 2.10 Flammendrag

Durch Windeinfluss kommt es neben der Flammenneigung auch zu einer Verbreiterung des Pooldurchmessers in leewärtige Richtung (Abb. 2.13), was zu einer Annäherung der Flammenoberfläche an benachbarte Objekte führen kann. Bei

Flammen mit einer rechteckigen Basis bleibt diese erhalten, es kommt aber zu einer Vergrößerung der Oberfläche. Bei einer runden Basis vergrößert sich die Oberfläche und es kommt zu einer Verformung vom kreisrunden ins elliptische. Nach Messungen des Flammendrags an zylindrischen LNG-Poolfeuern gilt die folgende Korrelation [15, 57]:

$$\frac{\bar{d}_w}{d} = 1.5 \text{Fr}_w^{0.069} \quad . \quad (2.37)$$

## 2.11 Luft-Entrainment

Aufgrund der Zündung über der Flüssigkeitsoberfläche kommt es sowohl im Bereich der klaren Verbrennungzone  $\bar{H}_{cl}$  als auch im Bereich der Plumezone  $\bar{H}_p$ , zu einem auftriebsbedingten Entrainment (Einmischung) von Umgebungsluft. In der Plumezone ist der Anteil an Brandgasen, Rußteilchen und Schwebstoffen klein und der gesamte Massen- oder Volumenstrom besteht vorwiegend aus der in geringer Höhe eingemischten Luft. Bis zu der Stelle, an der die Brandprodukte durch konvektiven Transport in die atmosphärischen Strömungsverhältnisse freigesetzt werden, wird die lokale Konzentration der Brandprodukte durch die Lufteinmischung bestimmt, was eine Berechnung des vorliegenden Massenstroms  $\bar{m}_{ent}$  notwendig macht. Unter normalen, atmosphärischen Bedingungen und typischen Brennstoffen kann der Massenstrom als Funktion der verschiedenen Höhen  $\bar{m}_{ent}(x)$  angegeben werden [15, 66]:

für  $x > \bar{H}$

$$\bar{m}_{ent}(x) = 0.07 \bar{Q}_{conv}^{\frac{1}{3}} (x - x_0)^{\frac{5}{3}} [1 + 0.0027 \bar{Q}_{conv}^{\frac{2}{3}} (x - x_0)^{-\frac{5}{3}}] \quad , \quad (2.38)$$

für  $x = \bar{H}$

$$\bar{m}_{ent}(x = \bar{H}) = 0.0056 \bar{Q}_{conv} \quad , \quad (2.39)$$

für  $x \leq \bar{H}$

$$\bar{m}_{ent}(x) = 0.0056 \bar{Q}_{conv} \frac{x}{\bar{H}} \quad . \quad (2.40)$$

Der in den Gln. 2.38 - 2.40 auftretende konvektive Wärmestrom  $\bar{Q}_{conv}$ , der in die Plumezone abgeführt wird, lässt sich berechnen nach:

$$\bar{Q}_{conv} = \rho \bar{u}_{ax} \pi \bar{r}_{Pl}^2 c_{Pl} (\bar{T}_{Pl} - T_a) = \bar{u}_{ax} \pi \bar{r}_{Pl}^2 c_{Pl} (\rho_a - \rho_{Pl}) \cdot T_A \quad , \quad (2.41)$$

oder näherungsweise:

$$\frac{\bar{\dot{Q}}_{\text{conv}}}{\dot{Q}_c} \lesssim 0.7 \quad . \quad (2.42)$$

## 2.12 Strömungsgeschwindigkeiten

Eine einfache, aber sehr bedeutende Möglichkeit zur Messung von Strömungsgeschwindigkeiten (Abb. 2.14) in Strömungen ist die Hitzedraht-Anemometrie [8, 67]. Dazu wird in die zu vermessende Strömung ein elektrisch beheizter Platindraht eingebracht, dessen Temperatur und damit dessen Widerstand sich mit der Strömungsgeschwindigkeit ändert, woraus sich der Betrag und die Richtung der Strömungsgeschwindigkeit bestimmen lassen. Nachteilig wirkt sich die Tatsache aus, dass der Platindraht katalytisch in den Verbrennungsprozess eingreift und die Strömungsgeschwindigkeit durch die Sonde selbst verändert werden kann.

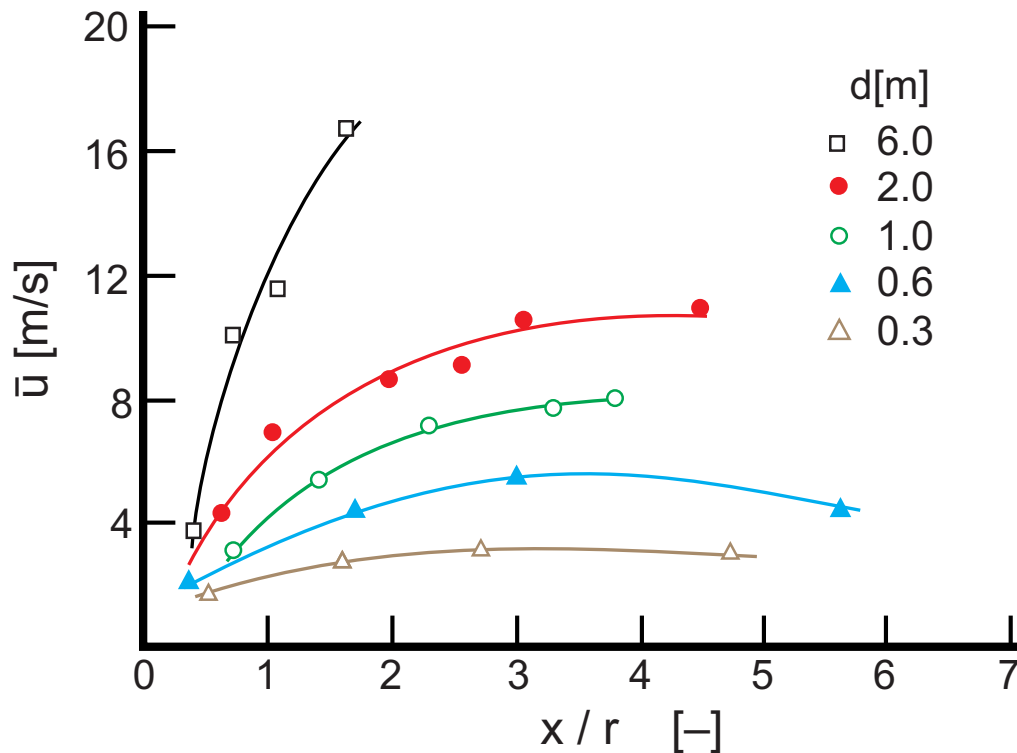


Abb. 2.14: Axiale mittlere Strömungsgeschwindigkeitsprofile einer Poolflamme in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser  $d$  [68]



Eine andere Methode zur Messung der Strömungsgeschwindigkeit ist die Laser-Doppler-Anemometrie (LDA), bei der Partikel dem Strömungsfeld zugesetzt werden, wobei es aufgrund der Impulserhaltung bei der Lichtstreuung zu einem Doppler-Effekt kommt [69]. Die entstehende Frequenzänderung lässt sich mit Hilfe des ursprünglichen Laserlichtes leicht messen, wobei sie proportional zur Geschwindigkeit ist. Werden zwei sich kreuzende Laserstrahlen genutzt, so lassen sich Betrag und Richtung der Geschwindigkeit im Kreuzungspunkt bestimmen. Bei der LDA wird die Geschwindigkeit von Partikeln gemessen, wobei die Partikel- und Gasgeschwindigkeit ungefähr gleich sind, solange die Partikel klein genug sind.

Bei der Teilchenspur-Methode (particle tracking) werden einer Strömung Teilchen im Mikrometer-Bereich zugesetzt, welche der Strömung folgen und photographisch bei definierter Belichtungszeit anhand von Teilchenspuren zur Vermessung von Geschwindigkeitsfeldern genutzt werden können [70]. Ein ähnliches Verfahren, die particle image velocimetry (PIV), benutzt den Lichtschnitt eines gepulsten Lasers, um die Partikel zu beleuchten und anschließend werden durch mehrere Laserpulse die Partikel als Lichtpunkte, die ihren Ort ändern, sichtbar gemacht. Hieraus lässt sich die Geschwindigkeit ermitteln, wobei zu beachten ist, dass die zugesetzten Teilchen den Verbrennungsprozess beeinflussen können.

## 2.13 Flammentemperaturen

Eine wichtige Aufgabe auf dem Gebiet der Verbrennungs- und Sicherheitstechnik ist die Bestimmung von Temperaturfeldern in Flammen [8]. Eine Bestimmung der zeitlich-gemittelten Flammentemperatur (s. Abb. 2.15) von Poolfeuern zeigt Werte zwischen  $1073 \text{ K} < \bar{T}_F < 1573 \text{ K}$ , wohingegen die maximalen Temperaturen für die meisten vorgemischten Kohlenwasserstoff/Luft-Flammen zwischen  $1773 \text{ K} < \bar{T}_{\max} < 2273 \text{ K}$  liegen [24]. Die Betrachtung der adiabaten Flammentemperatur  $T_{\text{ad}}$  ist eine oft verwendete Vereinfachung, aber weder messbar noch technisch zu realisieren. Es wird angenommen, dass der Verlust von Wärme in einem Verbrennungssystem gleich null ist, wodurch die berechnete adiabatische Flammentemperatur als maximale theoretische Flammentemperatur anzusehen ist. Die adiabatische Flammentemperatur verschiedener Brennstoffe liegt im Bereich von  $1573 \text{ K} < \bar{T}_{\text{ad}} < 2573 \text{ K}$  [71].

Die experimentelle Bestimmung von Flammentemperaturen stellt weiterhin eine Herausforderung dar. In der Literatur liegen nur wenige Messwerte von Flammentemperaturen großer Poolfeuer vor, die sich zum Teil um bis zu  $\Delta T \approx 600 \text{ K}$  unterscheiden [72–74].

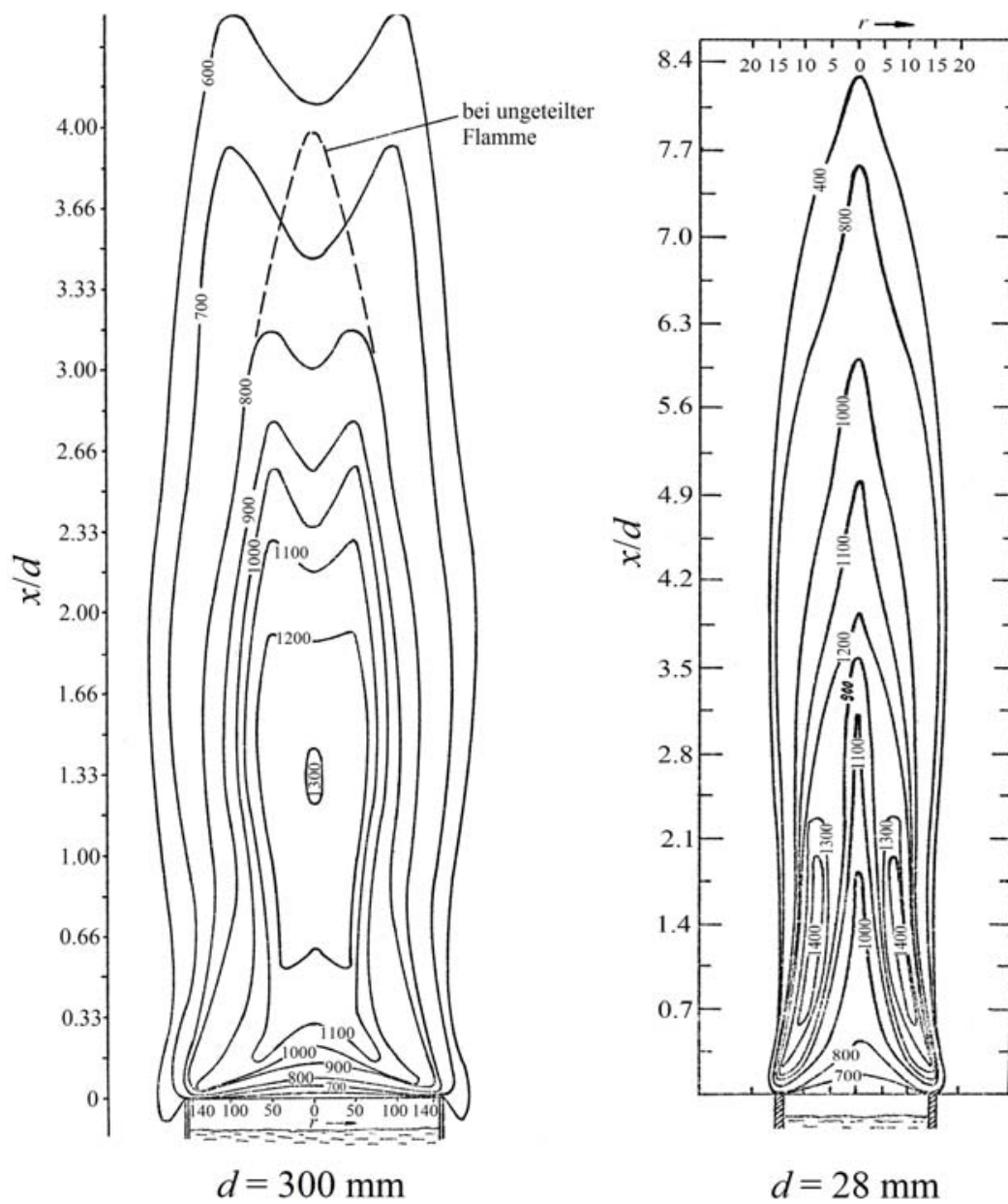


Abb. 2.15: Isothermen von Hexan-Tankflammen ( $d = 300 \text{ mm}$  und  $d = 28 \text{ mm}$ )  
[75]

## 2.14 Modelle der thermischer Strahlung

Es existieren die folgenden Modelltypen:

- (Semi)-empirische Modelle
- OSRAMO II, OSRAMO III
- Feldmodelle
- Integralmodelle
- Transiente Modelle

### 2.14.1 Semi-empirische Modelle

Semi-empirische Modelle sind weit verbreitete und relativ einfache, häufig stationäre Modelle, die im Wesentlichen die Flammgeometrie und die Wärmestrahlung von Pool-, Tank- und Lachenfeuern durch Einbeziehen mehrerer empirischer Parameter vorhersagen. In der Praxis werden häufig zwei Arten semi-empirischer Modelle eingesetzt. Die Mehrzahl der Modelle beschreibt die von der Flammenoberfläche ausgehende mittlere spezifische Ausstrahlung, woraus sich die mittlere Bestrahlungsstärke auf andere Objekte berechnen lässt, aber auch Punktquellen-Strahlungsmodelle, die auf Objekte außerhalb der Flamme auftreffende mittlere Bestrahlungsstärke direkt berechnen, sind bekannt. An dieser Stelle sollen nur die wichtigsten semi-empirischen Modelle erwähnt werden. Das thermische Strahlungsmodell nach Mudan [44, 45], welches hot spots und Rußzonen berücksichtigt sowie die lokale aktuelle spezifische Ausstrahlung nach Fay [22] und Raj [23] werden nicht weiter behandelt.

#### Konventionelles Zylinderflammen-Strahlungsmodell

Das konventionelle Zylinderflammen-Strahlungsmodell (SFM: Solid Flame Model, Abb. 2.16) ist eine Art Ein-Zonen-Strahlungsmodell bei dem für die maximale spezifische Ausstrahlung eines Pool- oder Tankfeuers gilt [15, 76]:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{SFM}}^{\text{ma}} = \bar{\epsilon}_F \sigma (\bar{T}^4 - \bar{T}_a^4) \neq f(d, \text{Brennstoff}) \quad . \quad (2.43)$$

Da sich der Emissionsgrad  $\epsilon_f$  aus den Emissionsgraden der Verbrennungsprodukte Ruß, Wasserdampf,  $\text{CO}_2$  zusammensetzt, sowie von der Weglänge durch das Feuer und der Wellenlänge  $\lambda$  abhängt, ist er eine sehr schwierig abzuschätzende

Größe. Erst bei einem Pooldurchmesser  $d \gtrsim 3\text{ m}$  gilt mit guter Näherung ein Emissionsgrad von  $\epsilon_f \approx 1$ , obwohl prinzipiell kein schwarzer Strahler vorliegt.

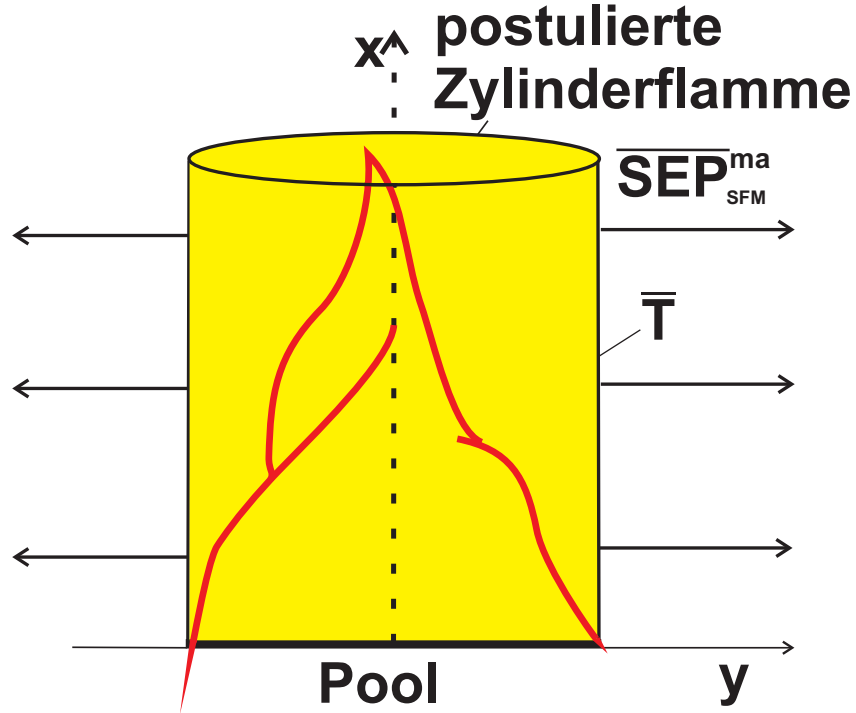


Abb. 2.16: SFM: Die Flamme wird als gleichmäßig strahlender Zylinder angesehen

Auch die Flammentemperatur ist sowohl experimentell als auch theoretisch schwierig zu bestimmen, da sie über die Flammenoberfläche hinweg nicht homogen ist. Eine experimentelle Bestimmung der mittleren spezifischen Ausstrahlung  $\overline{SEP}$  ist als abgeleitete Größe schwierig, da eine Abhängigkeit mit der Einstrahlzahl  $\varphi$  sowie der schwierig zu messenden Flammenoberfläche  $A_F$  und der Flammenlänge  $H$  besteht. Das SFM wird bisher häufig für scheinbar konservative Vorhersagen benutzt, obwohl neuere Messungen  $\overline{SEP}_{act}(d, f)$  nicht vorhersagen. [15, 25].

### Modifiziertes Zylinderflammen-Strahlungsmodell

Das modifizierte Zylinderflammen-Strahlungsmodell (MSFM, Abb. 2.17) ist ebenfalls prinzipiell ein Ein-Zonen-Strahlungsmodell, wobei sich die spezifische Ausstrahlung wie folgt berechnet [14, 15]:

$$\overline{SEP}_{MSFM}^{ma}(d, f) = \frac{\bar{f}_{rad}(d, f) \bar{\dot{m}}_f''(-\Delta h_c)}{4\bar{H}(d)/d} \quad , \quad (2.44)$$

oder als

$$\overline{\text{SEP}}^{\text{ma}}(d, f) = \bar{f}_{\text{rad}}(d, f) \frac{\bar{\dot{Q}}_c}{\bar{A}_f} \quad , \quad (2.45)$$

mit

$$\bar{\dot{Q}}_c = \bar{m}_f''(-\Delta h_c) A_P \equiv \bar{q}_f'' A_P \equiv \bar{\dot{Q}}_c \quad . \quad (2.46)$$

Unter Annahme eines zylinderförmigen Feuers mit  $\bar{A}_F = \pi d \bar{H}(d) + \pi d^2/4$  folgt aus Gl. 2.45 und Gl. 2.46:

$$\overline{\text{SEP}}^{\text{ma}}(d, f) = \bar{f}_{\text{rad}}(d, f) \cdot \bar{m}_f''(-\Delta h_c) \left( \frac{A_P}{\bar{A}_F} \right) = \frac{\bar{f}_{\text{rad}}(d, f) \cdot \bar{m}_f''(-\Delta h_c)}{4\bar{H}(d)/d + 1} \quad , \quad (2.47)$$

$\overline{\text{SEP}}^{\text{ma}}$  ist insbesondere von der Flammenoberfläche  $A_F$  und von der dimensionslosen Flammenlänge  $\bar{H}(d)/d$  abhängig, wobei  $A_F$  und  $\bar{A}_F$  schwierig zu messende und damit unsichere Größen sind. Der Strahlungsanteil  $\bar{f}_{\text{rad}}$  eines Einzelfeuers ist der Anteil der thermischen Strahlung am Wärmestrom unter Vernachlässigung schwarzer Rußschichten und ist definiert als:

$$\bar{f}_{\text{rad}} \equiv \frac{\bar{\dot{Q}}_{\text{rad}}^{\text{ma}}}{\bar{q}_f'' A_P} = \frac{\bar{\dot{Q}}_{\text{rad}}^{\text{ma}}}{\bar{q}_f'' A_P} \quad . \quad (2.48)$$

Obwohl mehrere Modellansätze und auch empirische Korrelationen für ein gemittelt  $\bar{f}_{\text{rad}}$  vorhanden sind, bleibt eine Berechnung dieser Größe schwierig [14, 46, 77]:

$$\bar{f}_{\text{rad}}^{\text{exp}}(d) \equiv \bar{f}_{\text{rad,max}} e^{-k_1 d} \quad , \quad (2.49)$$

$$\text{mit} \quad \bar{f}_{\text{rad,max}} = 0.35 \quad , \quad k_1 = 0.05 \text{ m}^{-1} \quad . \quad (2.50)$$

Der mittlere Strahlungsanteil  $\bar{f}_{\text{rad}}(d)$  nimmt mit dem Durchmesser  $d$  merklich ab, wobei allerdings bei großen Feuern die mittlere Bestrahlungsstärke der klaren Verbrennungszone ( $\bar{f}_{\text{rad,cl}} > \bar{f}_{\text{rad}}$ ) zu berücksichtigen ist, für die bislang keine Messungen vorliegen. Experimentell ermittelte Daten für Poolfeuer befinden sich in Tab. 2.4.

Der Strahlungsanteil  $\bar{f}_{\text{rad}}$  wird dabei über die sichtbare Flammenoberfläche  $\bar{A}_F$  (bzw. LZ) emittiert. Dabei läßt sich  $\bar{H}(d) \equiv \bar{H}_{\text{cl}}(d)$  mit  $\overline{\text{SEP}}_{\text{MSFM}}^{\text{ma}} \equiv \overline{\text{SEP}}_{\text{cl}}^{\text{ma}}$

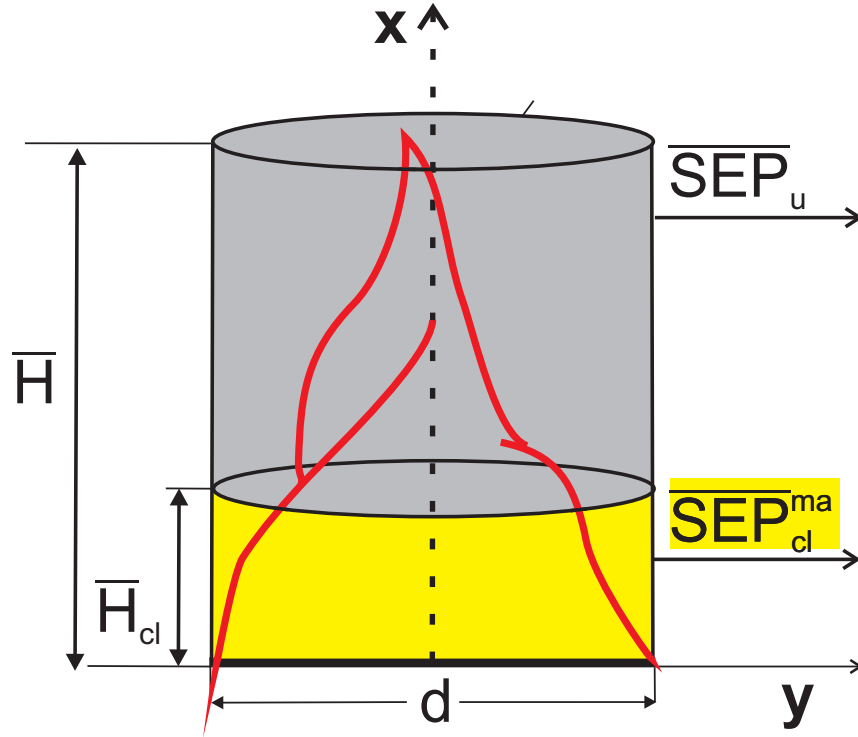


Abb. 2.17: MSFM: Die Flamme wird in eine hell leuchtende und somit strahlende Zone (LZ) und in eine nicht strahlende Zone (SZ) eingeteilt

sowie  $\bar{f}_{rad} \equiv \bar{f}_{rad,cl}$  der gelb leuchtenden heißen Verbrennungszone für rußende Einzelfeuer berechnen [15]:

$$\bar{H}_{cl}(d)/d = \frac{\bar{f}_{rad,cl}(d) \bar{\dot{m}}_f''(-\Delta h_c)}{4\overline{SEP}_{cl}^{ma}} \quad . \quad (2.51)$$

Für nicht-KW-Poolfeuer sowie für Poolfeuer mit  $\tilde{M}_{KW} < 33 \text{ kg/kmol}$  gilt mit einem Ein-Zonen-Strahlungsmodell zur Berechnung der mittleren SEP die folgende, auf Messungen an LNG- und LPG-Poolfeuern basierende Korrelation:

$$\overline{SEP}_{act} = \frac{0.35 \bar{\dot{m}}_f''(-\Delta h_c)}{10^3 \left[ 72 \bar{\dot{m}}_f''^{0.61} + 1 \right]} \quad . \quad (2.52)$$

Mit dem modifizierten Zylinderflammen-Strahlungsmodell ist auch eine Betrachtung als ein Zwei-Zonen-Strahlungsmodell, unter Berücksichtigung einer unteren heißen, klaren Verbrennungszone (LZ) mit  $\overline{SEP}_{cl}^{ma}$  und einer oberen schwarzen

Tab. 2.4: Gemessene Strahlungsanteile  $\bar{f}_{\text{rad}}(d, f)$  und maximale spezifische Austrahlungen  $\overline{\text{SEP}}^{\text{ma}}$  für verschiedene Brennstoffe [12, 14, 44–46]

Brennstoff	d [m]	$\bar{f}_{\text{rad}}$ [-]	$\overline{\text{SEP}}_{\text{max}}(d \rightarrow \infty)$ [kW/m <sup>2</sup> ]
Benzin	1.22	0.30 bis 0.40	
	1.53	0.16 bis 0.27	
	3.05	0.13 bis 0.14	
	1.0 bis 10.0	0.06 bis 0.1	130
Benzol	0.08	0.35	
	0.46	0.35	
	0.76	0.35	
	1.22	0.36 bis 0.38	130
Butan	0.31	0.20	
	0.46	0.21	
	0.76	0.27	225
JP-4	1.0	0.35	
	1.5	0.39	
	2.0	0.34	
	3.0	0.31	
	5.0	0.16	
	10.0	0.10	130

Rußzone (SZ) mit  $\overline{\text{SEP}}_{\text{u}}$ , möglich. Dabei lassen sich beide Zonen wie folgt berechnen [78]:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{cl}}^{\text{ma}}(d) = \overline{\text{SEP}}_{\text{max}}(1 - e^{-kd}) \quad \text{und} \quad (2.53)$$

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{u}} = (1 - \bar{a}_{\text{SZ}})\overline{\text{SEP}}_{\text{cl}}^{\text{ma}} + \bar{a}_{\text{SZ}}\overline{\text{SEP}}_{\text{SZ}} \quad . \quad (2.54)$$

Flächenanteile für verschiedene Brennstoffe sind in Tab. 2.5 aufgelistet.

### Punktquellen-Strahlungsmodell

Ein homogenes, isotropes und stationär brennendes adiabatisches Einzelpoolfeuer erzeugt bei aktueller spezifische Ausstrahlung  $\overline{\text{SEP}}(d)$  an der Flammenoberfläche

Tab. 2.5: Gemessene Flächenanteile  $\bar{a}_{SZ}$  der Rußzone (SZ) verschiedener Poolfeuer

Brennstoff	$\bar{a}_{SZ}$ für $d < 10$ m	$\bar{a}_{SZ}$ für $10 \text{ m} < d < 20$ m	$\bar{a}_{SZ}$ für $d > 20$ m
Aceton	0.98	0.98	0.98
Benzin	0.98	0.98	0.98
Benzol	0.98	0.98	0.98
Butan	0.77	0.88	0.92
Diesel	0.98	0.98	0.98
Ethan	0.23	0.32	0.45
Heptan	0.77	0.88	0.92
Hexan	0.77	0.88	0.92
JP-4	0.98	0.98	0.98
JP-5	0.98	0.98	0.98
Oktan	0.77	0.88	0.92
Rohöl	0.95	0.95	0.95
Toluol	0.98	0.98	0.98
Xylol	0.98	0.98	0.98

$\bar{A}_F$  und der Einstrahlzahl  $\varphi_{E,F}$  an einem beliebigen in der Umgebung liegenden Flächenelement (Empfänger), im horizontalen Abstand  $\Delta y$  vom Poolrand, die mittlere Bestrahlungsstärke  $\bar{E}(\Delta y/d)$  [15]:

$$\bar{E}(\Delta y/d, d) = \tau_{at} \alpha_E \varphi_{E,F}(\Delta y/d) \overline{SEP} \quad . \quad (2.55)$$

Zur Berechnung wird dabei die Einstrahlzahl  $\varphi_{E,F}$  benötigt die unter näherungsweiser Betrachtung der Flammenoberfläche als senkrechter Kreiszylinder (Abb. 2.18 und Abb. 2.19) aus der sich folgende Beziehung ergibt [14, 15, 25, 46]:

$$\begin{aligned} \varphi_{E,F} &= f(\bar{A}_F, \Delta y/d, \text{relative Orientierung } \beta_F, \beta_E) \quad , \quad (2.56) \\ &= \frac{1}{\pi \Delta \bar{A}_E} \int_{A_F} \int_{A_E} \frac{\cos \beta_F \cos \beta_E}{d^2 (\Delta y/d)^2} d\bar{A}_F d\bar{A}_E \quad . \end{aligned}$$

Durch Berechnung des Doppelintegrals Gl. 2.56 erhält man für  $\varphi_{E,F,h}$ ,  $\varphi_{E,F,v}$  und  $\varphi_{E,F,max}$ :



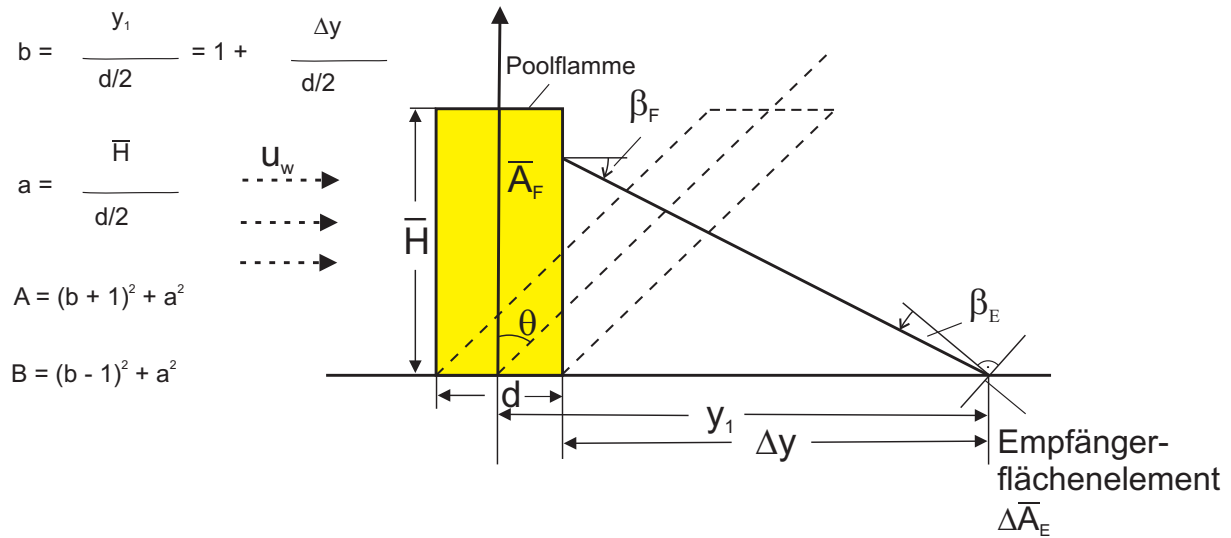


Abb. 2.18: Strahlungsaustausch zwischen einer zylinderförmigen Poolflamme und einem auf Bodenhöhe positionierten Empfängerflächenelement, welche eine Orientierung  $\beta_{PF}$ ,  $\beta_E$  zueinander aufweisen

$$\varphi_{E,F,h} = \frac{1}{\pi} \left[ \arctan \sqrt{\frac{b+1}{b-1}} - \left( \frac{b^2-1+a^2}{\sqrt{AB}} \right) \arctan \sqrt{\frac{(b-1)A}{(b+1)B}} \right], \quad (2.57)$$

$$\varphi_{E,F,v} = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{1}{b} \arctan \frac{a}{\sqrt{b^2-1}} + \frac{a(A-2b)}{b\sqrt{AB}} \arctan \sqrt{\frac{(b-1)A}{(b+1)B}} - \frac{a}{b} \arctan \sqrt{\frac{b-1}{b+1}} \right], \quad (2.58)$$

$$\varphi_{E,F,max} = \sqrt{\varphi_{E,F,h}^2 + \varphi_{E,F,v}^2}. \quad (2.59)$$

Analog zu den Gln. 2.57 - 2.59, kann auch eine Berechnung für den schrägen (bei Windeinfluss) Kreiszyylinder als Flammenoberfläche erfolgen [14, 46]. Auch eine Berechnung speziell für Tankfeuer ist möglich. Da Feuer auch teilweise mit Ruß bedeckt sein können, ist eine Berechnung der Einstrahlzahl  $\varphi_{E,F}$ , unter der Annahme teilweiser Bedeckung mit Ruß sinnvoll [12]. Eine weitere nützliche Näherung ist die vereinfachte Berechnung der Einstrahlzahl  $\varphi_{E,F}$ , indem die Kreiszyylinderfläche der Flamme durch eine entsprechende Rechteckfläche ersetzt wird [25, 58]. Eine mehr realistische Berechnung der Einstrahlzahl  $\varphi_{E,F}$ , bietet die Annahme eines geneigten elliptischen Zylinders, was aber eine komplizierte Rechnung nach sich zieht [71].

Der Berechnung der Bestrahlungsstärke  $\bar{E}$  liegt auch ein praktischer Nutzen zugrunde. Durch Messungen der Bestrahlungsstärke  $\bar{E}$  mit Hilfe von Radiometern kann die SEP als wichtige Größe ermittelt werden.

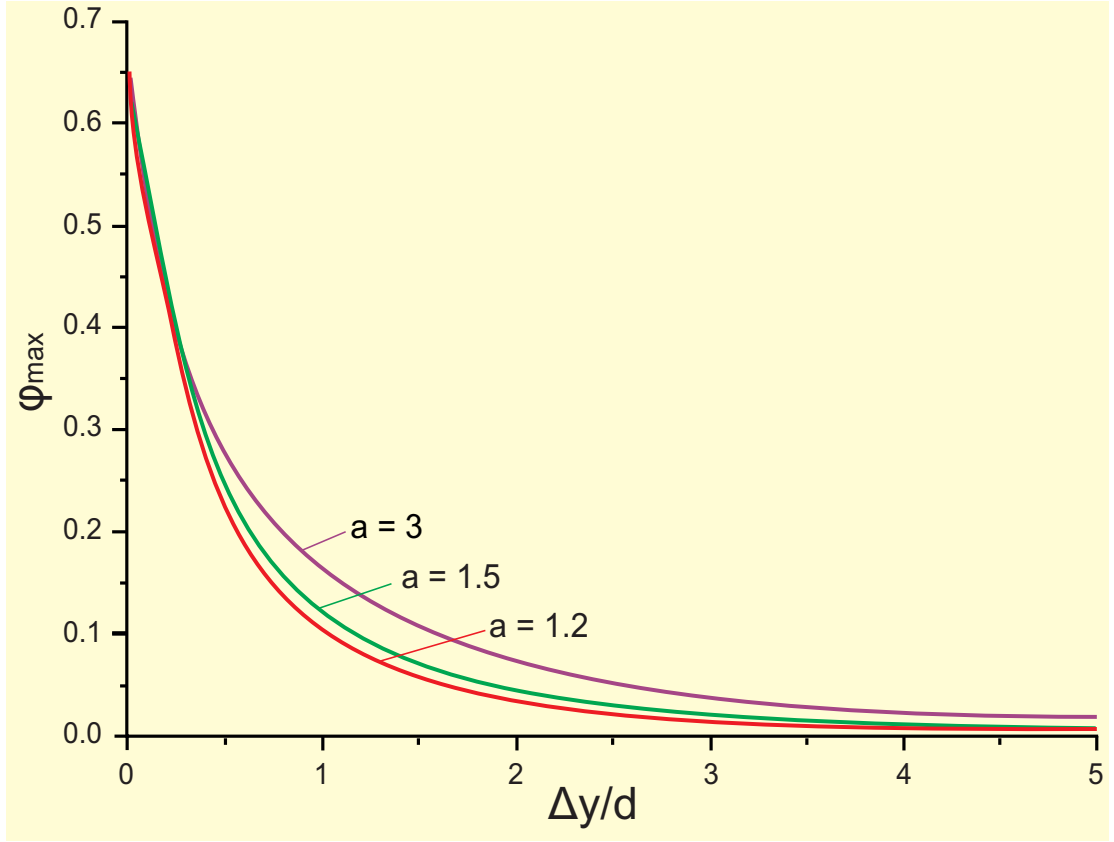


Abb. 2.19: Einstrahlzahl  $\varphi_{E,F,\max}$  in Abhängigkeit vom relativen horizontalen Abstand  $\Delta y/d$  sowie der relativen Flammenlänge  $\bar{H}/d = a/2$

Auf der Basis der Bestrahlungsstärke kann im Rahmen der Modellierung von Pool- und Tankfeuern auf das Punktquellen-Strahlungsmodell (Abb. 2.20) oder das API-521 Modell zurückgegriffen werden, welche aber nur eine sehr eingeschränkte Gültigkeit aufweisen und mit großen Unsicherheiten behaftet sind. Die Bestrahlungsstärke berechnet sich nach der folgenden Beziehung [14, 15]:

$$\bar{\dot{Q}}_{\text{rad}} = 4\pi\Delta y^2\bar{E}_{\text{PSM}} \quad , \quad \text{für } \Delta y/d > 4 \quad , \quad (2.60)$$

und entsprechend für den totalen Strahlungswärmestrom:

$$\begin{aligned} \bar{\dot{Q}}_{\text{rad}} &= \bar{f}_{\text{rad}} \bar{\dot{Q}}_{\text{c}} = \bar{f}_{\text{rad}} A_{\text{P}} \bar{\dot{m}}_{\text{f}}''(-\Delta h_{\text{c}}) \quad , \\ &= \bar{f}_{\text{rad}} A_{\text{P}}(-\Delta h_{\text{c}}) \bar{\dot{m}}_{\text{f,max}}''(1 - e^{-k\beta d}) \quad . \end{aligned} \quad (2.61)$$

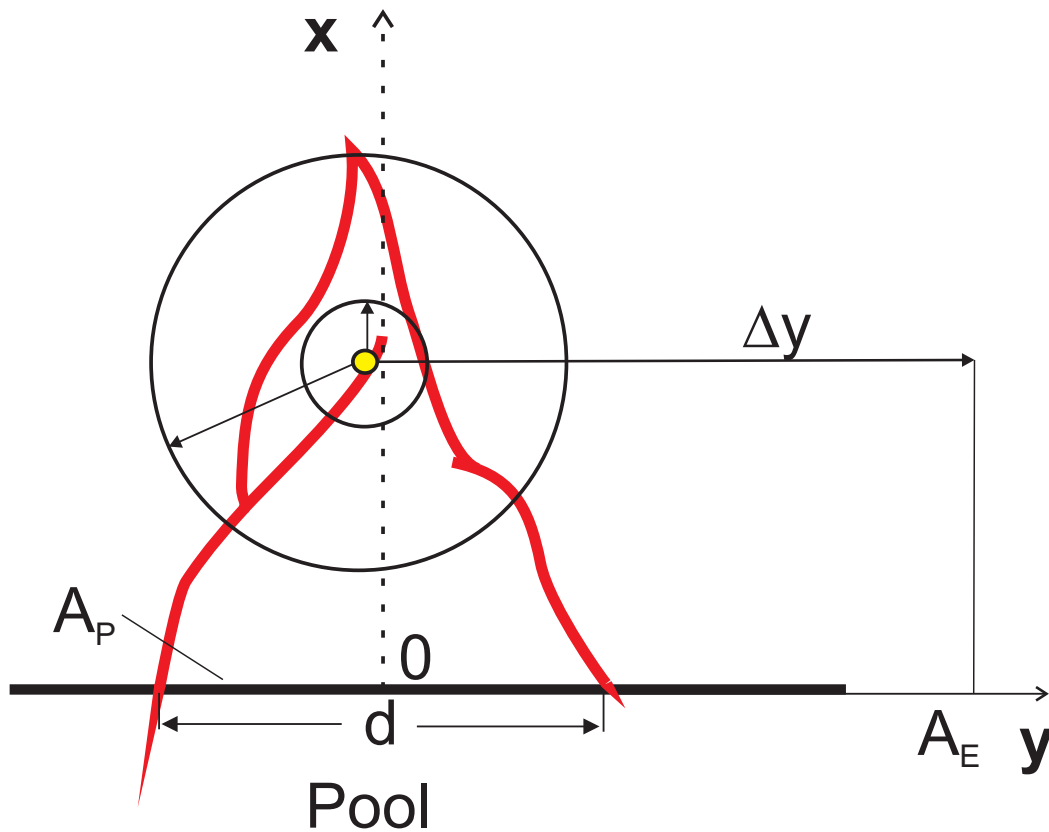


Abb. 2.20: Punktquellen-Strahlungsmodell: Die Flamme wird als punktförmige Strahlungsquelle auf der Flammenachse angenommen

Es findet eine Unterteilung der  $\bar{E}_{\text{PSM}}$  für Fernfeld ( $\Delta y/d > 4$ ):

$$\bar{E}_{\text{PSM}}(\Delta y/d) = \frac{\bar{f}_{\text{rad}} A_P (-\Delta h_c) \bar{m}_{f,\text{max}}'' (1 - e^{-k\beta d})}{16(\Delta y/d)^2} \quad , \quad (2.62)$$

und für das Nahfeld  $0.5 < \Delta y/d < 4$  statt:

$$\bar{E}_{\text{PSM}} = \phi_N 0.131 \bar{f}_{\text{rad}} (-\Delta h_c) \bar{m}_{f,\text{max}}'' (1 - e^{-k\beta d}) \quad . \quad (2.63)$$

Wobei für  $\phi_N$  gilt:

$$\phi_N = \frac{\bar{H}/d}{\pi(\Delta_Y/d)^2} \quad . \quad (2.64)$$

### 2.14.2 OSRAMO II

Mit den OSRAMO-Strahlungsmodellen [Organized Structure Radiation Models] werden erstmals die in Poolflammen auftretenden kohärenten Strukturen (Abb. 2.21) berücksichtigt. Es wird näherungsweise angenommen, dass die hot spots (hs), Rußballen (sp), die effektive Reaktionszone (re) und die Brennstoff-Ballen (fp) homogene Gebilde mit charakteristischen Längen  $l_i$  darstellen. Dabei können diese organisierten dissipativen Strukturen die thermische Strahlung unterschiedlich stark emittieren, absorbieren und transmittieren. Weiterhin gilt die Annahme, dass die Strukturen  $i$  jeweils unterschiedliche, jedoch konstante mittlere Temperaturen  $\bar{T}_{hs} \neq \bar{T}_{sp} \neq \bar{T}_{re} \neq \bar{T}_{fp}$  sowie mittlere effektive Absorptionskoeffizienten  $\bar{\alpha}_{hs} \neq \bar{\alpha}_{sp} \neq \bar{\alpha}_{re} \neq \bar{\alpha}_{fp}$  aufweisen. Eine weitere Annahme ist es, dass die hot spots und Rußballen mit durchmesserabhängigen Flächenanteilen  $\bar{a}_{hs}(d) = 1 - \bar{a}_{sp}(d)$  an der Flammenoberfläche auftreten, wodurch erstmals das dreidimensionale Wärmestrahlungsphänomen berücksichtigt wird.

Das Strahlungsmodell OSRAMO II basiert auf den experimentellen Daten großer JP-4-Einzelpoolfeuer [3, 16]. Die in Abb. 2.22 gezeigte mittlere aktuelle spezifische Ausstrahlung berechnet sich nach:

$$\overline{SEP}_{act}''(d) = \bar{a}_{hs}(d) \overline{SEP}_{act}^{ma}(d) + \bar{a}_{sp}(d) \overline{SEP}_{sp}(d) \quad , \quad (2.65)$$

mit den spezifischen Ausstrahlungen der dissipativen Strukturen  $i = hs, sp$ :

$$\overline{SEP}_i(d) = (1 - \bar{\tau}_i(d)) \sigma (\bar{T}_i^4 - \bar{T}_a^4) + -\bar{\tau}_i(d) (1 - \bar{\tau}_{re}(d)) \sigma (\bar{T}_{re}^4 - \bar{T}_a^4) \quad , \quad (2.66)$$

den modifizierten, effektiven Transmissionsgrad der Strukturen  $i = re, hs, sp$ :

$$1 - \bar{\tau}_i(d) = -\bar{\epsilon}_{eff,i}(d) = 1 - e^{\bar{\alpha}_{eff,i}(d)} \quad , \quad (2.67)$$

den modifizierten, effektiven Absorptionskoeffizienten der Strukturen  $i$ :

$$\bar{\alpha}_{eff,i}(T) = \bar{\alpha}_{eff,i} b_i = 1.81 \cdot 10^3 \bar{f}_v b_i \bar{T}_i \approx 1.12 \cdot 10^{-3} b_i \bar{T}_i \quad , \quad (2.68)$$

den charakteristischen Längen der Strukturen i:

$$\bar{l}_i(d) = \frac{\bar{\hat{\alpha}}_{\text{eff},i}}{\bar{\alpha}_{\text{eff},i}} d = b_i d \quad , \quad (2.69)$$

sowie den Flächenanteilen der Strukturen  $i = \text{hs, sp}$ :

$$\bar{a}_{\text{hs}}(d) = 1 - \bar{a}_{\text{sp}}(d) = 1 - e^{-\left(\frac{d_0}{d}\right)^{a_3}} \quad . \quad (2.70)$$

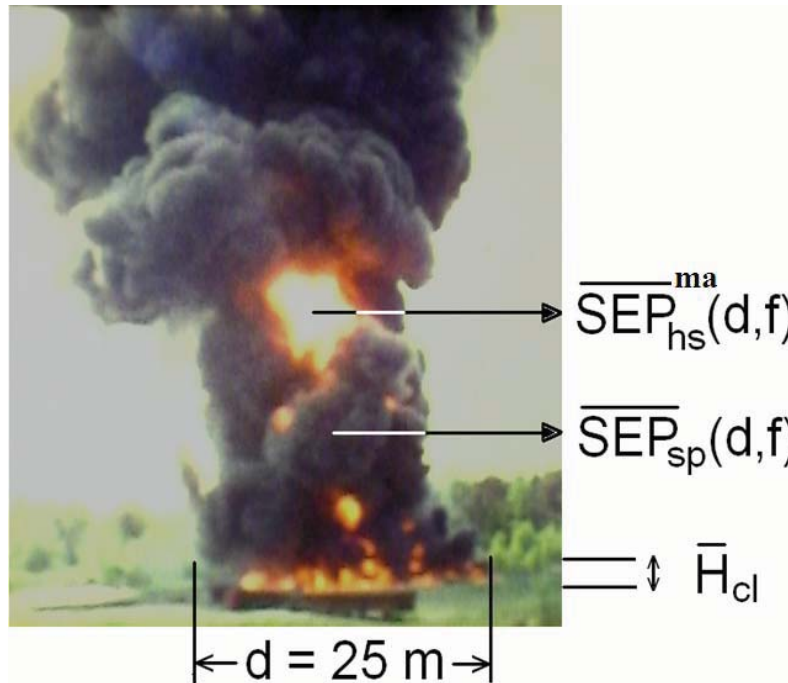
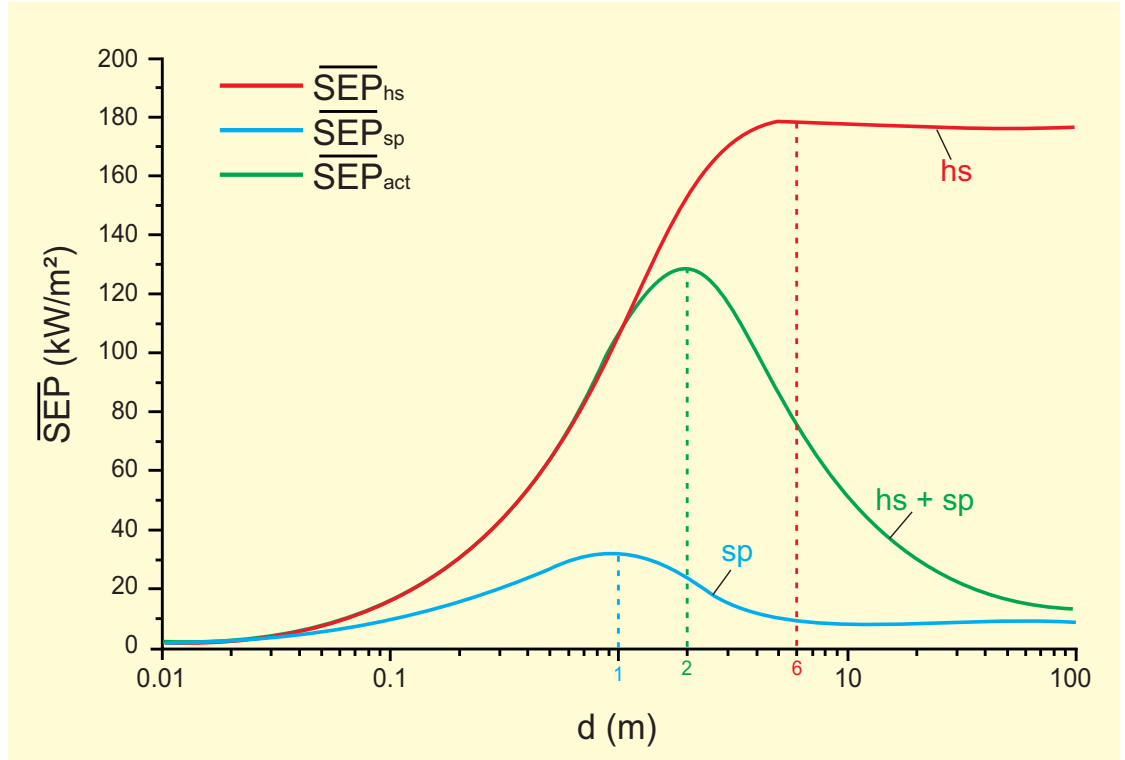


Abb. 2.21: OSRAMO II: Die mittlere spezifische Austrahlung  $\overline{\text{SEP}}_{\text{act}}''$  der Flamme setzt sich aus der mittleren spezifischen Ausstrahlung der Rußballen  $\overline{\text{SEP}}_{\text{sp}}$  und hot spots  $\overline{\text{SEP}}_{\text{hs}}$  zusammen

Aus einer multiplen, nicht linearen Regression für den Brennstoff JP-4 können die Temperaturen  $\bar{T}_i$  und die modifizierten effektiven Absorptionskoeffizienten  $\bar{\hat{\alpha}}_{\text{eff},i}$  der Strukturelemente  $i = \text{re, hs, sp}$  sowie zwei empirische Parameter ermittelt werden [25, 79–81]. Die Ergebnisse sind in Tab. 2.6 dargestellt:

Mit Hilfe des Strahlungsmodells OSRAMO II lässt sich der in Abb. 2.23 gezeigte Strahlungsanteil  $\bar{f}_{\text{rad}}$  berechnen. Eine erste Auswertung der Buncefield-Ereignisse

Abb. 2.22: Mit OSRAMO II berechnete  $\overline{SEP}(d)$ -KurvenTab. 2.6: Gemessene Flächenanteile  $\bar{a}_{SZ}$  der Rußzone (SZ) verschiedener JP-4 Poolfeuer

$\bar{T}_{re}$ [K]	$\bar{T}_{hs}$ [K]	$\bar{T}_{sp}$ [K]	$\bar{\hat{a}}_{eff,re}$ [m <sup>-1</sup> ]	$\bar{\hat{a}}_{eff,hs}$ [m <sup>-1</sup> ]	$\bar{\hat{a}}_{eff,sp}$ [m <sup>-1</sup> ]	$d_0$ [m]	$a_3$ [-]
1413	1329	632	0.380	0.404	1.035	3.260	1.104

zeigt, dass für größere Feuer ( $d \gtrsim 5$  m), die wenig rußbedeckte heiße, klare Verbrennungszone eine dominante Rolle spielt [4].

Für Einzelpoolfeuer gelten im Rahmen von OSRAMO II die folgenden Zusammenhänge:

$$\bar{f}_{rad,cl}''(d) \equiv \bar{f}_{rad,cl}'' \approx \frac{(1 + 4H/d)\overline{SEP}_{cl}^{ma}}{3.24 \cdot 10^3 T_{f,b} \sqrt{d}} \quad , \quad d > 3 \text{ m} \quad , \quad (2.71)$$

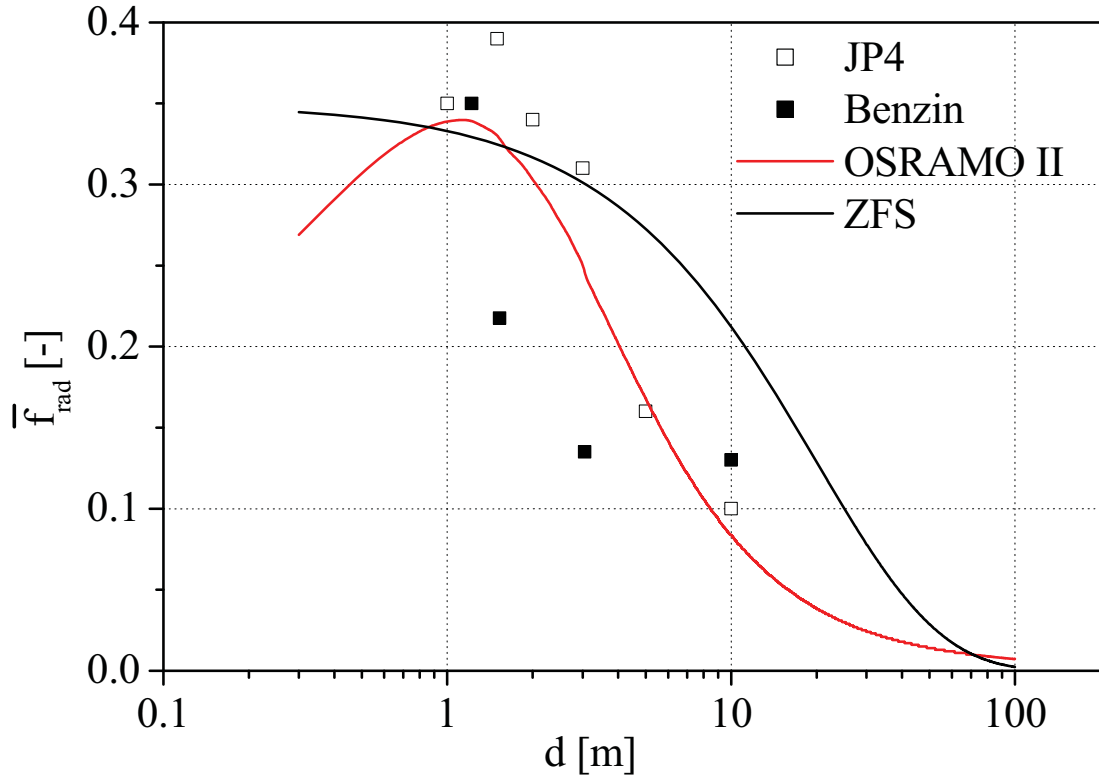


Abb. 2.23: Mit dem Zylinderflammen-Strahlungsmodell bzw. OSRAMO II berechnete  $\bar{f}_{\text{rad}}(d)$  und Abschätzung für JP-4 [81] und Benzin [82]

mit

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{cl}}^{\text{ma}} \equiv \overline{\text{SEP}}_{\text{cl}}'' = 180 \text{ kW/m}^2 \quad . \quad (2.72)$$

Hieraus ergibt sich die Zahlenwertgleichung:

$$\overline{H}_{\text{cl}}''/d \approx 1.39 \cdot 10^{-3} \bar{f}_{\text{rad,cl}}''(d) \overline{\dot{m}}_f''(-\Delta h_c) \quad . \quad (2.73)$$

### 2.14.3 OSRAMO III

Das Strahlungsmodell OSRAMO III ist ein stochastisches Modell, dass die mittlere spezifische Ausstrahlung  $\overline{\text{SEP}}_{\text{act}}'''(d, f)$  basierend auf den experimentellen Daten großer JP-4-Einzelpoolfeuer berechnet [16, 25, 83]:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{act}}'''(d, f) = \int_{\overline{\text{SEP}}} g_{\text{SEP}}(\overline{\text{SEP}}, d, f) \overline{\text{SEP}} d\overline{\text{SEP}} \quad , \quad (2.74)$$

$$= \bar{a}_{\text{hs}}(d, f) < \overline{\text{SEP}}_{\text{hs}}(d, f) > + \bar{a}_{\text{sp}}(d, f) < \overline{\text{SEP}}_{\text{sp}}(d, f) \quad , \quad (2.75)$$

mit den Beziehungen:

$$\bar{a}_{\text{hs}}(d, f) = \int_{41.5}^{430} g_{\text{SEP}}(\overline{\text{SEP}}_{\text{hs}}, d, f) d\overline{\text{SEP}}_{\text{hs}} \quad \text{und} \quad (2.76)$$

$$\bar{a}_{\text{sp}}(d, f) = \int_6^{41.5} g_{\text{SEP}}(\overline{\text{SEP}}_{\text{sp}}, d, f) d\overline{\text{SEP}}_{\text{sp}} \quad . \quad (2.77)$$

Die Flammentemperatur  $\bar{T}$  lässt sich aus den empirisch ermittelten log-normalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen  $\bar{g}_T(\bar{T}, d, f)$  und bezüglich der  $\overline{\text{SEP}}$  aus  $\bar{g}_{\text{SEP}}(\overline{\text{SEP}}, d, f)$  ermitteln. Die log-normalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen sind bisher nicht vorhersagbar. Eine Vorhersage der Bereiche  $\overline{\text{SEP}}_{\text{hs}}(f)$ ,  $\overline{\text{SEP}}_{\text{sp}}(f)$  der hot spots und Rußballen ist möglich [14, 80, 81]. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen  $\bar{g}_T(\bar{T}, d, f)$  und  $\bar{g}_{\text{SEP}}(\overline{\text{SEP}}, d, f)$  sind in der Abb. 2.24 und Abb. 2.25 dargestellt.

### 2.14.4 Feldmodelle

Die grundsätzlich stationären Feldmodelle basieren auf der Lösung der zeitlich gemittelten Navier-Stokes-Differentialgleichung und sind daher meist nur für die Vorhersage nicht-reaktiver Strömungen geeignet. Häufig werden zusätzliche empirische Submodelle eingebunden. Aufgrund ihrer mathematischen Komplexität benötigen diese Modelle schon große Rechenzeiten.





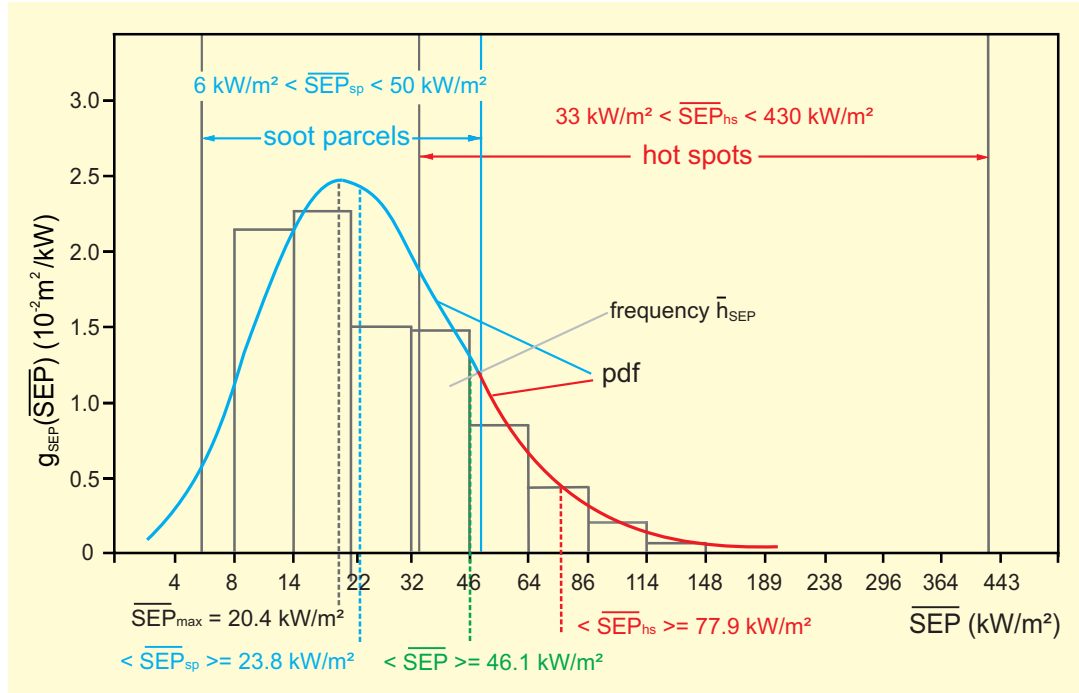


Abb. 2.25: Histogramm  $\bar{h}_{SEP}$  und log-normale Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines JP-4-Einzelpoolfeuers ( $d = 16$  m)

großen Rechenzeiten, die den Einsatz von Rechenclustern erforderlich machen, befindet sich die CFD-Simulation in einer erfolgsversprechenden Entwicklung.

## 2.15 Wechselwirkung zwischen Feuern

Über die Wechselwirkung von zwei und mehr Feuern liegen bisher vergleichsweise sehr wenige experimentelle wie theoretische Untersuchungen vor.

Zur Diskussion der Wechselwirkung von Feuern sind in Abb. 2.26 definierten Größen zweckmäßig.

Die ersten Untersuchungen zur Wechselwirkung von Feuern wurden von Putnam [84, 85] an Propan- und Wasserstoff-Brennerflammen durchgeführt. Dabei wurden sehr hohe Re-Zahlen  $Re > 5000$  eingestellt. Die Untersuchungen wurden mit einem Brennerdurchmesser von  $d = 0.3$  cm sowie mit relativen Abständen von  $D/d < 2$  durchgeführt und ergaben für die Flammenlänge den folgenden Zusammenhang:

$$\bar{H}/d = 7.44 \left( \frac{N \dot{m}_f'' T_{bp}}{M d^{0.5}} \right)^{0.4} . \quad (2.78)$$

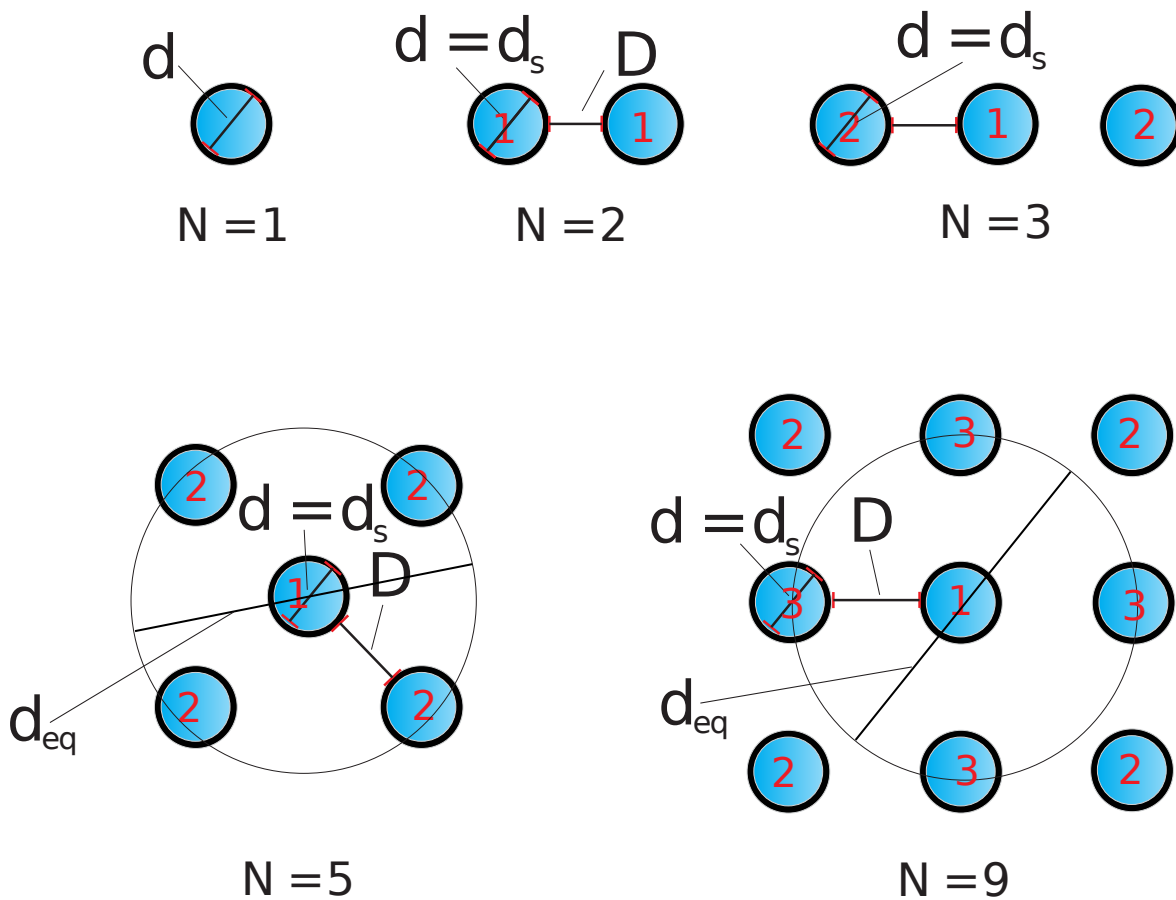


Abb. 2.26: Matrixanordnung wechselwirkender Poolfeuer;  $N = 1$ : *Einzelfeuer*,  $N \geq 2$ : zwei und mehr *einzelne* Poolfeuer;  $d = d_{eq}$ : äquivalentes Einzelfeuer

Die beobachteten Flammen sind um bis zu einem Faktor 2.3 höher im Vergleich zum gleichen einzelnen Brenner mit gleicher Strömungsgeschwindigkeit. Eine Flammenverschmelzung wurde ab einem relativen Abstand von  $D/d = 2d$  festgestellt. Thomas et al. [86] untersuchten die Flammenverschmelzung von zwei rechteckigen Erdgas-Brennern mit den Maßen 60 cm x 30 cm. Das Phänomen der Flammenverschmelzung wurde durch den Druckabfall im Raum zwischen den Flammen, infolge der Begrenzung des Luft-Entrainments erklärt. Untersucht wurden relative Abstände  $0.05 \leq D/d \leq 1$ . Es wurde eine Energiebilanz aufgestellt die Auftrieb und Neigungswinkel mit dem zwischen den Flammen

entstehenden Unterdruck gleichsetzt. Für den relativen Abstand an dem die Flammenverschmelzung beginnt wurde der Zusammenhang in Gl. 2.79 gefunden.

$$\frac{\bar{H}}{d} = 9 \left( \frac{D}{d} \right)^{0.5} . \quad (2.79)$$

Baldwin [87] untersuchte theoretisch den Zusammenhang zwischen Flammenlänge und dem relativen Abstand wechselwirkender Feuer anhand von Literaturwerten. Die hauptsächlich auf Erdgasflammen basierenden Untersuchungen lieferten:

$$\frac{D}{d} = 0.14 \left( \frac{\bar{H}}{d} \right)^{0.96} . \quad (2.80)$$

In [88] wird beschrieben, dass die dimensionslose, auf den äquivalenten Durchmesser bezogene Flammenlänge von  $N = 3$  und  $N = 4$  Hexan-Poolfeuern ( $d = 12$  cm) mit steigendem relativen Abstand  $D/d$  zwischen den Pools abnimmt. Es wird ein Korrekturfaktor bezüglich der geometrischen Anordnung eingeführt anhand dessen die Flammenlängen korreliert werden:

$$\left( \frac{\bar{H}}{d_{\text{eq}}} \right)_{\text{multi}} = \left( \frac{N(d^2 + D^2)}{N d^2 + D^2} \right)^{-0.4} \left( \frac{\bar{H}}{d_{\text{eq}}} \right)_{\text{single}} . \quad (2.81)$$

Eine ähnliche Modellierung ist auch in [89] zu finden. Hier wurden wechselwirkende Feuer bestehend aus Propan-Brennern ( $d = 15$  cm) und speziellen Holzscheite-Brennern ( $d = 15$  cm) mit bis zu  $N = 25$  einzelnen Feuern untersucht. Es wurde die folgende Korrelation nach Zukoski [90] für wechselwirkende Feuer erweitert und überprüft:

$$\frac{\bar{H}}{d_{\text{eq}}} = 3.3 \left( \frac{\dot{Q}_c}{\rho_a c_{p,a} T_a g^{0.5} W^{2.5}} \right)^{0.4} = 3.3 Q^{*0.4} , \quad (2.82)$$

mit

$$W = \sqrt{N} d + (\sqrt{N} - 1) D . \quad (2.83)$$

Eine Überprüfung zeigte, dass für eine  $3 \times 3$ -Matrix die folgenden Kamigawa-Korrelationen bessere Übereinstimmungen erzielten:

$$\frac{\bar{H}}{d_{\text{eq}}} = 2.85 Q^{*0.68} \text{ für Propan} , \quad (2.84)$$

und

$$\frac{\bar{H}}{d_{\text{eq}}} = 3.66 Q^{*0.82} \text{ für Holzscheite} . \quad (2.85)$$

Kamikawa et al. präsentierten in [91] CFD-Simulationen einer 2 x 2-Matrix mit  $d = 15$  cm Brennern, welche mit dem Fire Dynamic Simulator (FDS) durchgeführt wurden. Zur Beschreibung des Verbrennungsprozesses wurde ein "mixture fraction-Model" verwandt. Für die Strahlung wurde die Strahlungstransportgleichung unter Annahme eines grauen Gases gelöst. Fukuda et al. [92] zeigten, dass sich die Pulsationsfrequenz von zwei n-Heptan- und Methanol-Poolfeuer ( $d = 4.9$  cm) mit dem relativen Abstand  $D/d$  ändert. Untersuchungen der Abbranddauern und maximale Flammenlängen von wechselwirkender Heptan-Poolfeuern wurden in [6, 93, 94] vorgestellt. Es wurden bis zu einer Anzahl von  $N = 225$  einzelne Feuer untersucht und ein relativer Abstand von  $3.3 \leq D/d \leq 8.3$  verwandt. Es wurde erstmals die Verteilung der Brenndauern zwischen den einzelnen Pools in einer Matrix aufgeschlüsselt und diskutiert. Als Zusammenhang zwischen dem relativen Abstand und der maximalen Flammenlänge  $H_{\max}$  wird der folgende Zusammenhang angegeben:

$$\frac{D}{d} = 0.33 \left( \frac{H_{\max}}{d} \right)^{0.96} . \quad (2.86)$$



## 3 Experimentelles

### 3.1 Brennstoffe

Als Brennstoff für die Experimente im Labormaßstab wurde technische reines Di-tert-butylperoxid ( $> 99\%$ ) sowie technisch reines n-Heptan ( $> 98\%$ ) verwendet. Die Feldversuche wurden ebenfalls mit technisch reinem Di-tert-butyl Peroxid ( $> 99\%$ ) durchgeführt sowie mit einer Hexan-Fraktion, bestehend aus n-Hexan ( $54\%$ ), 2-Methylpentan ( $19.4\%$ ), 3-Methylpentan ( $19.4\%$ ), Methylcyclopentan ( $7.2\%$ ) und anderen Spurenstoffen, wobei der Anteil an aromatischen Verbindungen wie Benzol  $< 0.1\%$  beträgt. Versuche mit einer Hexan-Fraktion im Labormaßstab zeigten, dass die Ergebnisse nicht, signifikant von denen mit technisch reinem n-Heptan abweichen. Somit sind die Ergebnisse der Versuche im Labormaßstab und die Feldversuche miteinander vergleichbar. Der schematische Aufbau der Versuche kann der Abb. 2.26 entnommen werden.

### 3.2 Versuchsaufbau

#### Labormaßstab

Die neuartigen Experimente im Labormaßstab wurden in einem speziellen, für Feuertests ausgelegten Bunker (ca.  $10\text{ m} \times 5\text{ m} \times 5\text{ m}$ ) durchgeführt. Vor den Versuchen wurde ein Belüftungssystem benutzt, um im Bunker vergleichbare Umgebungsbedingungen zu schaffen. Um windstille Bedingungen zu erreichen, wurde das Belüftungssystem während der Versuche abgeschaltet. Als Pooldurchmesser für die Experimente an *wechselwirkenden* Feuern wurde  $d = 6\text{ cm}$  gewählt. Die Versuche wurden mit einer Anzahl an Feuern  $2 \leq N \leq 9$  durchgeführt.

Der Abstand zwischen den Pools wurde in Abhängigkeit der Stärke der Wechselwirkung zwischen  $0.08 \leq D/d \leq 4$  gewählt. Die Experimente wurden auf einer Gitterkonstruktion (s. Abb. 3.1) mit einer definierten Maschenweite durchgeführt, um genaue Abstände zwischen den einzelnen Pools zu gewährleisten. Ebenso ist es durch die Gitterkonstruktion möglich, Wägezellen zur Bestimmung der Massenabbrandraten unterhalb des Gitters anzubringen, womit erstmals eine simultane Bestimmung der Massenabbrandraten aller wichtigen Positionen möglich wird. Die Brennstofftemperatur vor der Zündung der Experimente betrug  $T_f \approx 293\text{ K}$ .

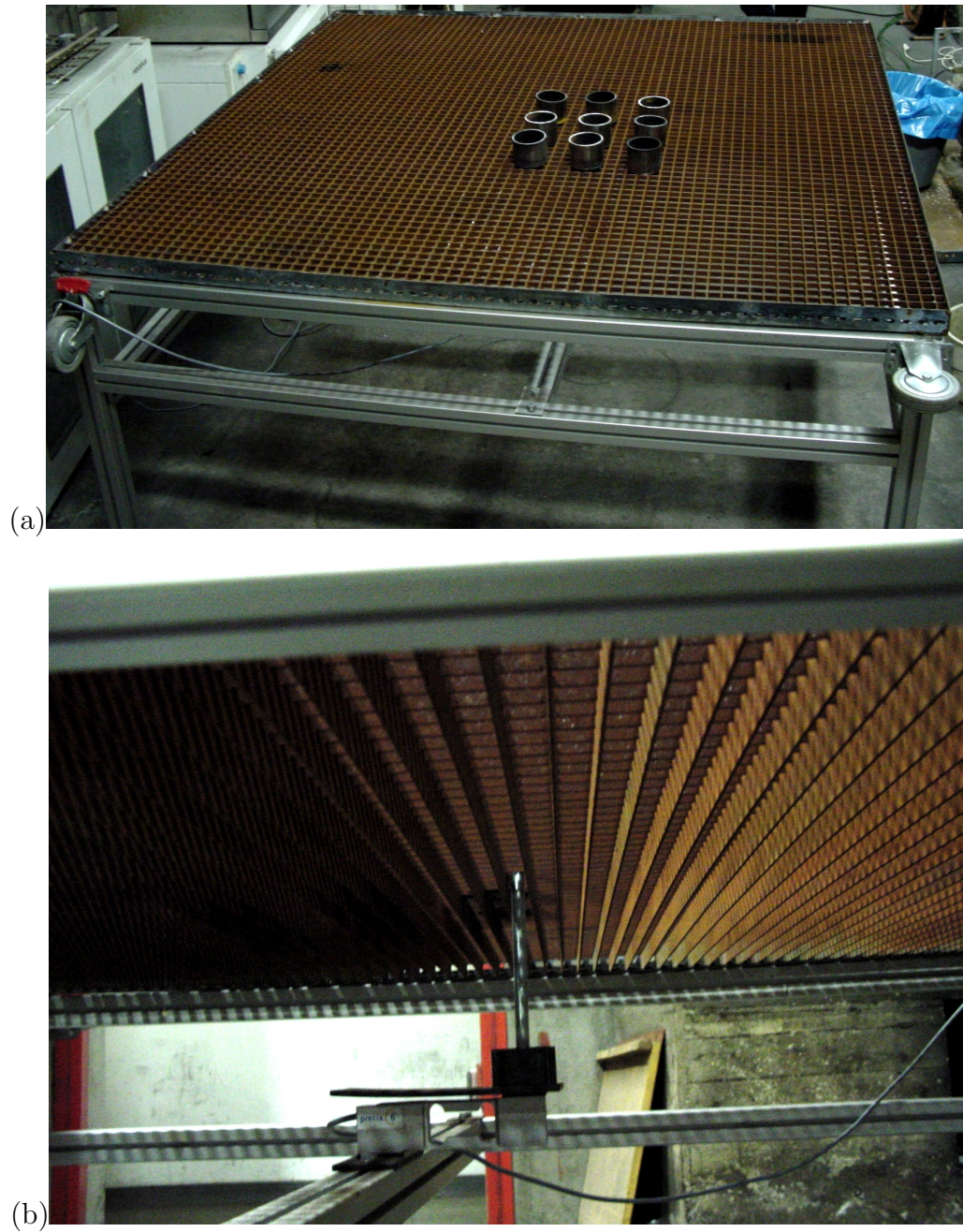


Abb. 3.1: (a) Gitter-Konstruktion zur Untersuchung wechselwirkender Feuer im Labormaßstab mit (b) unterhalb des Gitters angebrachte Wägezellen





Abb. 3.2: Sprengplatz des BAM TTS zur Durchführung der Feldversuche

Die gewählten Abstände zwischen den Pools ergeben sich im Falle der KW-Brennstoffe (für Hexan, Heptan die Gefahrenklasse A I) aus der TRbF 20: "Läger, Abstände, Schutzstreifen und Tankgruppenabstände" [95]. Die TRbF 20 sieht je nach Lagervolumen, Art der Tanks und Ausrichtung der Tanks, Mindestabstände zwischen den einzelnen Tanks von  $0.3 < D/d < 0.6$  vor. Die Anzahl der untersuchten Tanks kann in dieser Untersuchung auf  $N \leq 9$  begrenzt werden, da die TRbF 20 für eine Anzahl von maximal 10 Tanks in beliebiger Bauart für eine Tankgruppe vorsieht. Zwischen einzelnen Tankgruppen sind geeignete Schutzmaßnahmen wie z. B. Schutzstreifen einzurichten, so dass eine Tankgruppe als in sich abgeschlossen angenommen werden kann. Die Sicherheitsabstände in Peroxidlägern werden durch die BGV B4 "Organische Peroxide" geregelt [96]. Die BGV B4 sieht für Lager organischer Peroxide (der Gefahrengruppe OP Ib für DTBP) je nach Lagervolumen, Art des Lagers und dessen Ausrichtung, Mindestabstände zwischen einzelnen Lagern von bis zu  $D < 4 d$  vor. Die oben genannten Abstände wurden im Labormaßstab mit kleiner Schrittweite über den gesamten Bereich hin untersucht.

## Feldversuche

Die neuartigen Feldversuche wurden auf dem Sprengplatz des BAM TTS (Testgelände Technische Sicherheit) in Horstwalde, 50 km südlich von Berlin, durchgeführt (s. Abb. 3.2). Auf dem Sprengplatz mit einem Durchmesser von 400 m können Versuche bis zu einem TNT-Äquivalent von 150 kg durchgeführt werden.

Zum Schutz der Umgebung ist der Sprengplatz von einem Erdwall umgeben. Die Versuche wurden während einer Wetterlage mit schwachem Wind durchgeführt. Als Pooledurchmesser für die Experimente an wechselwirkenden Feuern wurden  $d = 1.5$  m gewählt. Die Versuche wurden mit einer Anzahl an Feuern  $N = 2$  durchgeführt (s. Abb. 3.3). Der Abstand zwischen den Pools wurde in Abhängigkeit der Stärke der Wechselwirkung zwischen  $0.17 \leq D/d \leq 1$  gewählt.

## 3.3 Massenabbrandraten

Die Bestimmung des Masseverlustes im Labormaßstab erfolgte mit einer elektronischen Präzisionswaage der Fa. Sartorius und Wägezellen der Fa. HBM sowie eigens dafür entwickelten LabView Programmen. Der Masseverlust wurde dabei mit einer zeitlichen Auflösung von  $\Delta t = 0.01$  s und einer Präzision von 0.1 g bestimmt. Die Bestimmung des Masseverlustes während der Feldversuche erfolgte mit Industriewaagen der Fa. Schoutz sowie eines eigens dafür entwickelten LabView Programms. Der Masseverlust wurde dabei mit einer zeitlichen Auflösung





Abb. 3.3: Aufbau der Abbrandwannen ( $d = 1.5 \text{ m}$ ) mit  $D/d = 0$  für die Durchführung der Feldversuche

von  $\Delta t = 0.2 \text{ s}$  und einer Präzision von  $0.01 \text{ kg}$  bestimmt. Die Massenabbrandrate ergibt sich in beiden Fällen als  $-\frac{dm_f''}{dt}$  im Bereich zwischen 20 % bis 80 % des Masseverlustes. Jeder Versuch im Labormaßstab wurde fünfmal wiederholt. Die Feldversuche konnten nur einmal pro Abstand durchgeführt werden.

### 3.4 Flammenlängen

Zur Bestimmung der momentanen Flammenlängen wurden VHS- und digitale Videoaufnahmen gemacht. Sequenzen dieser Aufnahmen wurden während der stationären Brenndauer, in 25 Einzelbilder pro Sekunde zerlegt. Mit einem MATLAB Algorithmus wurde die momentane Flammenlänge als höchster Punkt der RGB Farbe (R 255, G 242, B 199) definiert (s. Abb. 3.4). Diese spezielle Farbe

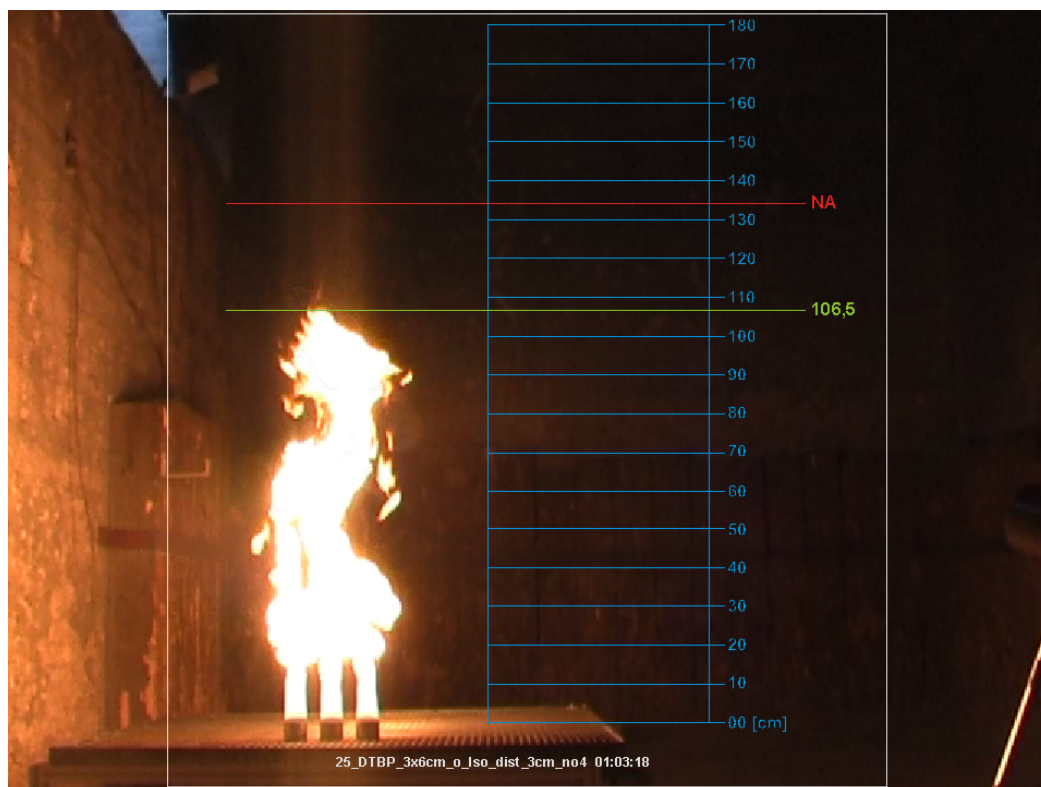


Abb. 3.4: Bestimmung der momentanen Flammenlänge  $H = 106.5 \text{ cm}$  eines wechselwirkenden DTBP-Poolfeuers ( $d = 6 \text{ cm}$ ) mit  $N = 3$

wurde ausgewählt, da diese Farbe, unabhängig von der verwendeten Optik und dem Hintergrundlicht, immer in der Spitze der Flamme zu finden war. Es wurden ca. 3000 Bilder pro Versuch zeilenweise ausgelesen. Die zeitlich-gemittelten  $\bar{H}$  und maximalen Flammenlängen  $H_{\max}$  wurden mit dem Intermittenzkriterium

$I(H)$  nach Zukoski [97] bestimmt. Für die zeitlich-gemittelte Flammenlänge ergibt sich dabei ein Kriterium von  $I(H) = 0.5$ , wobei für die maximale Flammenlänge  $I(H) = 0.05$  gilt (s. Abb. 3.5) [98]. Das Intermitenz-Kriterium wurde angewandt,

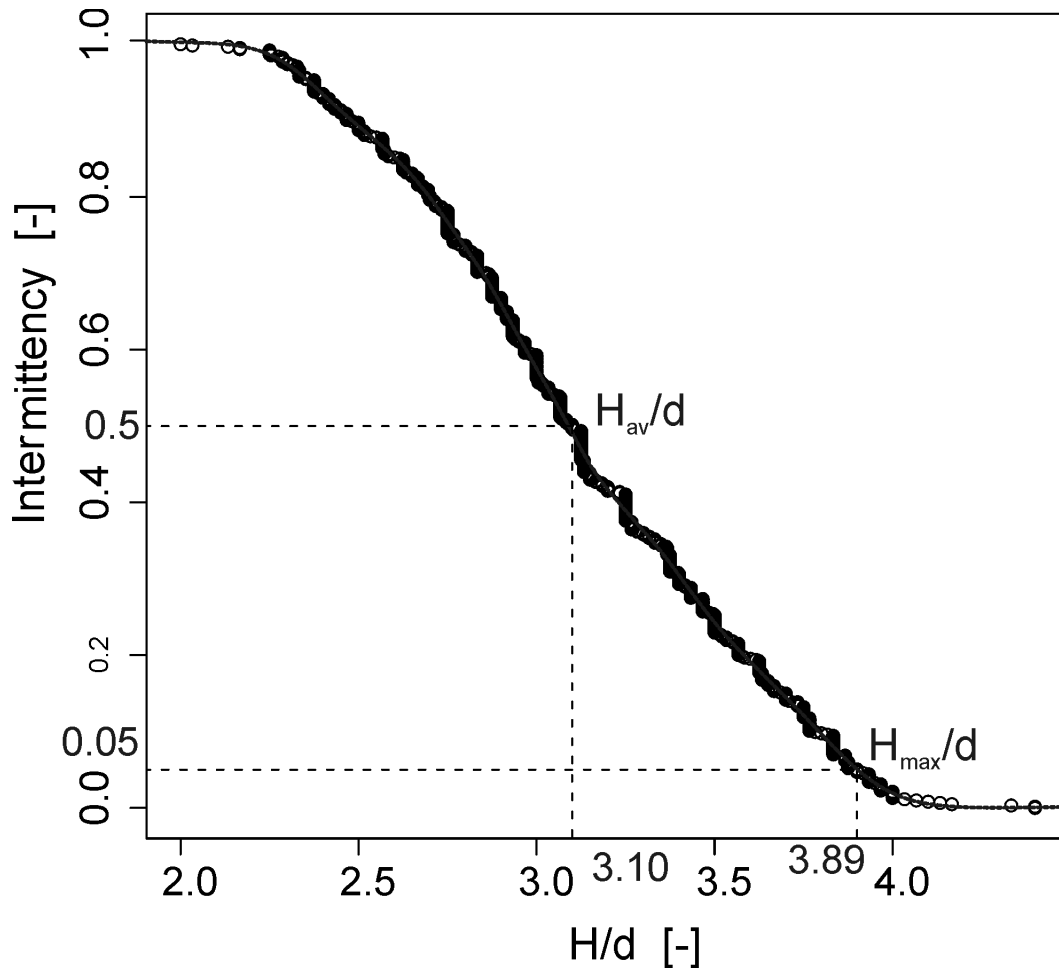


Abb. 3.5: Intermitenz  $I(H/d)$  eines DTBP Poolfeuers ( $d = 3$  m)

da dabei die Lage von Flammenlängen-Verteilungen miteinander verglichen werden und somit kein Vergleich momentaner Werte stattfindet. Um als Maßstab die Größe eines Pixels zur Auswertung zu ermitteln, wurde vor den Versuchen eine Messlatte in unmittelbarer Nähe der Brandstellen aufgebaut und aus den betreffenden Perspektiven Bilder zur Abmessung aufgenommen. Die Messlatte wurde vor Beginn des Abbrandes entfernt, um den Abbrand nicht zu beeinflussen.

### 3.5 Flüssigkeits- und Flammentemperaturen

Ein Thermoelement besteht aus zwei Drähten unterschiedlicher Metalle oder Metallegierungen, welche an einem Ende verlötet oder verschweißt werden. Eine Erwärmung dieser Verbindungsstelle erzeugt eine Thermospannung, den sogenannten Seebeck-Effekt. Das Thermoelement ist mit einer Ausgleichslei-

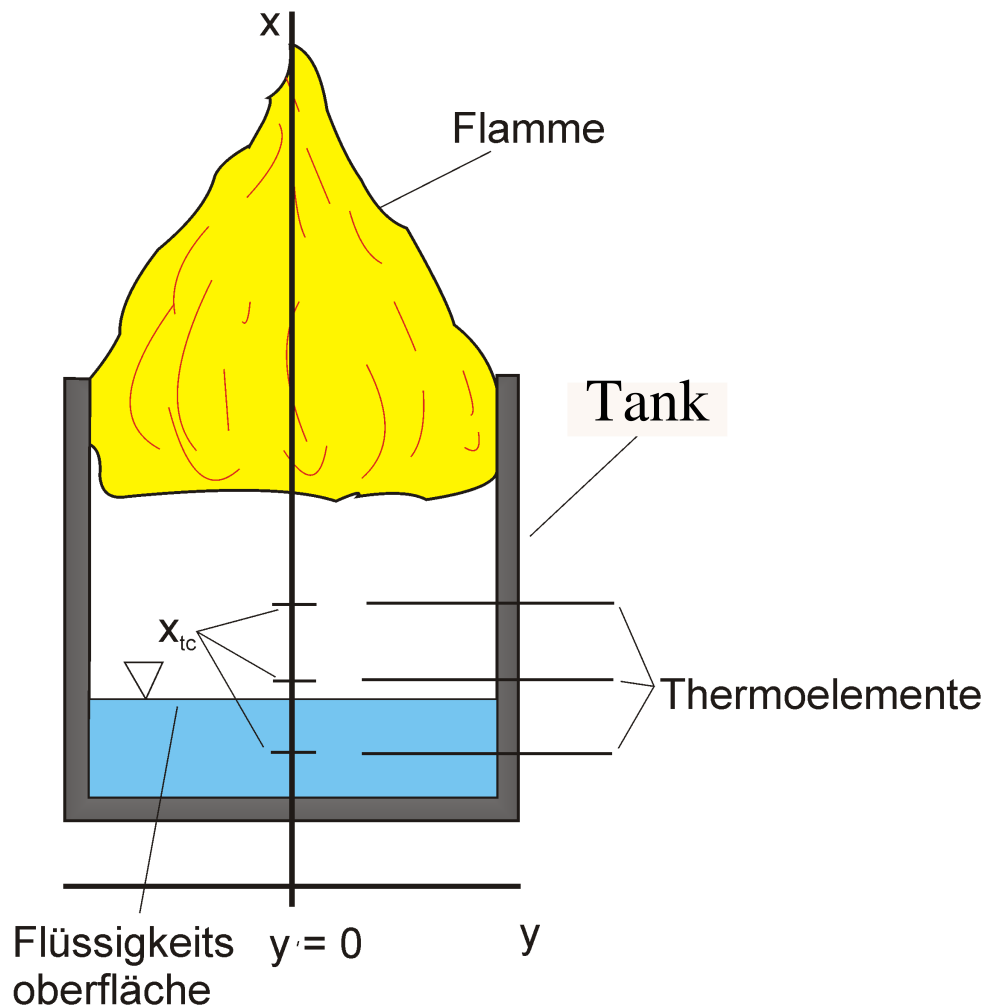


Abb. 3.6: Schematische Darstellung der Messung der Flüssigkeitstemperaturen während der Verbrennung

tung, bestehend aus dem gleichen Material wie das Thermoelement, verbunden. Temperaturmessung mit Thermoelementen sind immer eine Temperatur-

Differenzmessung. Es wird der Unterschied zwischen der Messstelle und einer Vergleichsstelle bestimmt. Die Vergleichsstellen-Temperatur muss daher konstant gehalten werden. Die Auswahl der Metalle bzw. Metalllegierung für ein Thermoelement richtet sich hauptsächlich nach dem zu messenden Temperaturbereich sowie der benötigten Ansprechgeschwindigkeit. Bei den Versuchen zur Messung der Flüssigkeitstemperaturen wurden Mantelthermoelemente des Typs K (Ni-CrNi) mit einem Durchmesser  $d = 1$  mm verwendet, wobei die Abtastrate der Messung bei  $\Delta t = 0.1$  s lag. Aufgrund des geringen Temperaturunterschiedes zwischen dem zu messenden Medium und der Umgebungstemperatur konnten Verlustwärmeströme durch Wärmeleitung und Wärmestrahlung vernachlässigt werden. In der Abb. 3.6 wird der Aufbau zur Bestimmung der Flüssigkeitstemperaturen während der Verbrennung dargestellt.

Es wurden DTBP- und TBPB-Poolfeuer mit einem Durchmesser von  $d = 0.04$  m,  $0.05$  m,  $0.06$  m,  $0.09$  m,  $0.13$  m untersucht, wobei jeder Versuch fünfmal wiederholt wurde.

Zur Messung der Flammentemperatur wurden Thermoelemente mit offenen Thermoperlen in einem Keramikmantel (Außendurchmesser  $d = 3$  mm) des Typs S (PtRh-Pt) verwendet. Das einzelne Poolfeuer wurde bis in eine Höhe von  $x = 0.65$  m und die wechselwirkenden Feuer bis in eine Höhe von  $x = 0.4$  m untersucht (Abb. 3.7). Der Durchmesser der Thermoelemente betrug dabei  $d = 1$  mm, wobei die Abtastrate der Messung bei  $\Delta t = 0.01$  s lag. Aufgrund der bei den hohen Temperaturen in den Flammgasen auftretenden Verlustwärmeströmen durch Wärmestrahlung wurden die Thermoelementmessungen nach Fristrom und Westenberg [75, 99] korrigiert:

$$\bar{T}_{wa} = \bar{T}_{tc} + \Delta T = \bar{T}_{tc} + \frac{\epsilon \sigma d_{tc} (T_{tc}^4 - T_a^4)}{2 \lambda_F} . \quad (3.1)$$

Es wurde ein einzelnes DTBP-Poolfeuer mit einem Durchmesser von  $d = 6$  cm untersucht sowie ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer mit  $N = 5$  und  $D = 2$  cm (s. Abb. 3.7). Dabei war es über eine Traverse mit Feingewinde möglich, axiale Positionen von  $\Delta x = 1$  cm zu vermessen. Für jede axiale Position wurde ein zeitlicher Mittelwert über eine Zeitdauer von  $\Delta t = 60$  s ermittelt. Bei allen Messungen wurden die Thermoelemente anhand von Eichkurven kalibriert. Bei den Messungen der Flammentemperaturen wurde darauf geachtet, dass die Flamme senkrecht brannte und nicht durch Luftbewegungen im Raum gestört wurde.

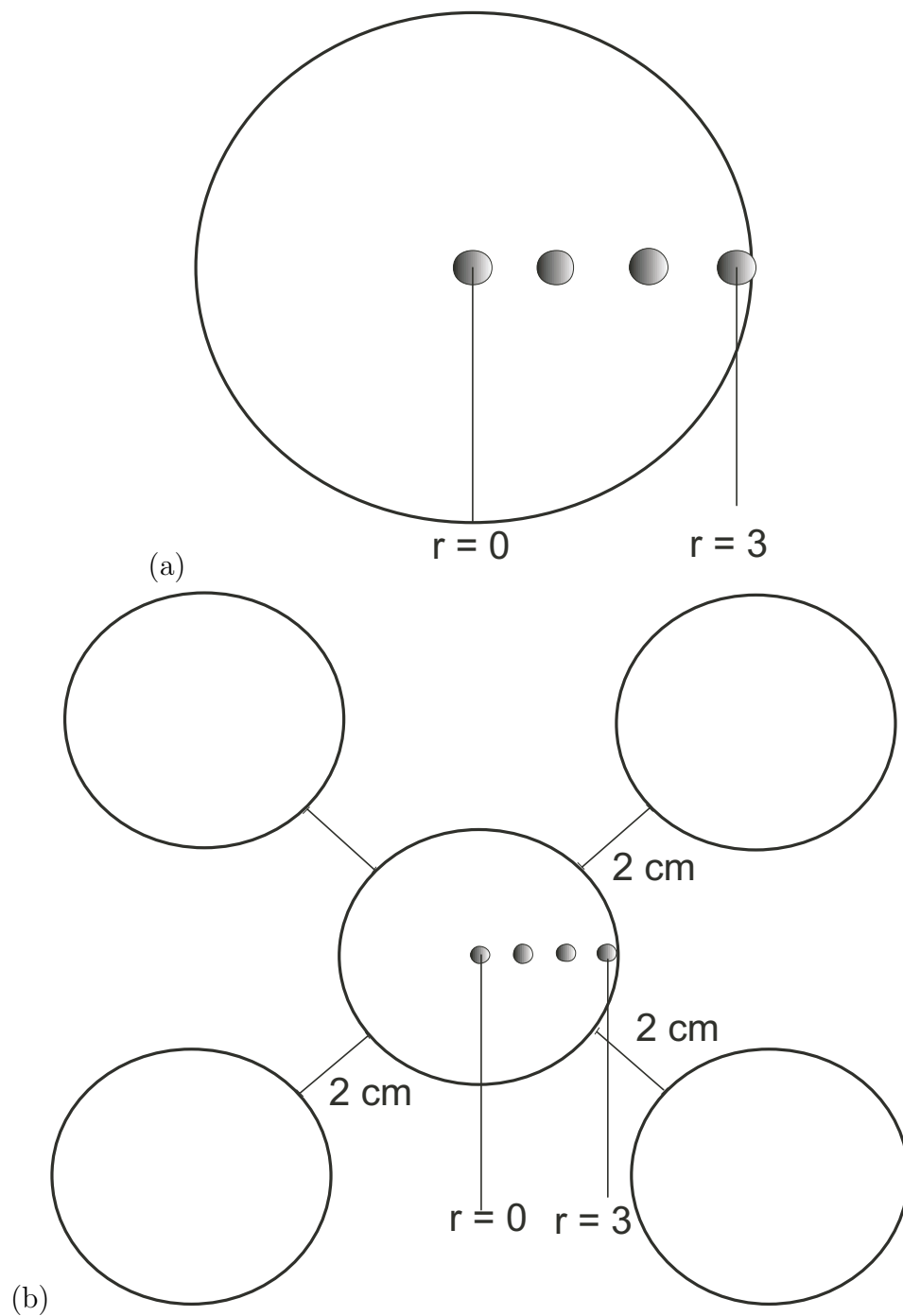


Abb. 3.7: (a) Aufbau zur Bestimmung der Flammentemperaturen eines einzelnen DTBP-Poolfeuers  $d = 6$  cm; (b) von wechselwirkenden Heptan- und DTBP-Poolfeuern  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D = 2$  cm



### 3.6 Spezifische Ausstrahlung und Bestrahlungsstärken

Die Bestrahlungsstärken in den Feldversuchen wurden mit Ellipsoidal-Radiometern (Schmidt-Bölter-Sensoren, s. Abb. 3.8) der Medtherm Ltd. gemessen. Dabei wurden drei mit Druckluft gespülte und wassergekühlte Radiometer mit einem oberen Aussteuerbereich von  $200 \text{ kW/m}^2$ ,  $100 \text{ kW/m}^2$  und  $50 \text{ kW/m}^2$  eingesetzt. Des Weiteren wurden in den Feldversuchen und im Labormaßstab ungekühlte Radiometer, mit einem oberen Aussteuerbereich von  $2 \text{ kW/m}^2$  genutzt. Der geometrische Öffnungswinkel der Radiometer betrug  $150^\circ$ . Das Fenstermaterial

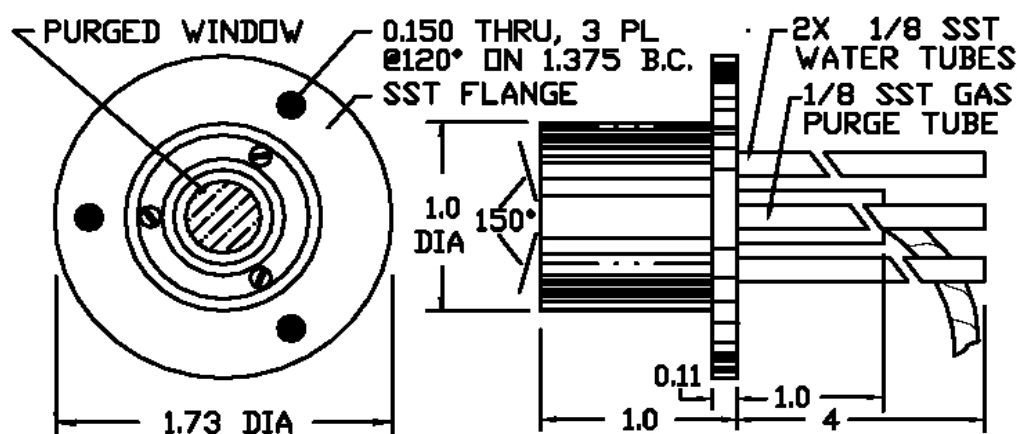


Abb. 3.8: Schematischer Aufbau der Radiometer zur Messung der Bestrahlungsstärken [100]

der Radiometer bestand aus Zinksulfid  $\text{ZnS}$ , was zu einem detektierbaren Wellenlängenbereich von  $0.5 \mu \lesssim \lambda \lesssim 14.5 \mu\text{m}$  führt. Die Abstände der Messköpfe vom Feuer können der Tab. 3.1 entnommen werden. Schmidt-Bölter-Sensoren, bestehen aus einer Folie, die innen mit dem Gehäuse verknüpft ist. Sowohl in der Mitte der Folie als auch am Rand befinden sich Drähte, ähnlich einem Thermoelement. Erwärmt sich nun die Folie entsteht ein Spannungsunterschied zwischen dem Draht in der Mitte der Folie und dem äußeren Draht, der aufgenommen werden kann. Schmidt-Bölter-Sensoren sind besonders für hohe Bestrahlungsstärken geeignet, wie sie von Poolfeuern emittiert werden. Die ermittelten Bestrahlungsstärken  $E(\Delta y)$  wurden nach [18] gegen einen Abstand  $\Delta y = 0$  extrapoliert, um eine SEP zu erhalten. Dieses Vorgehen hat den Vorteil,

Tab. 3.1: Abstände zwischen den Sensoren und der Flamme

Brennstoff	d [m]	Leistung [kW/m <sup>2</sup> ]	N	$\Delta y$ [m]
DTBP	0.06	2	2	2.0
DTBP	0.06	2	3	2.0
DTBP	0.06	2	5	3.5
DTBP	0.06	2	9	4
DTBP	1.5	2	2	38.5
DTBP	1.5	50	2	3.5
DTBP	1.5	100	2	2.5
DTBP	1.5	200	2	1.5
n-Heptan	0.06	2	2	1.1
n-Heptan	0.06	2	3	1.1
n-Heptan	0.06	2	5	1.1
n-Heptan	0.06	2	9	1.1
Hexan	1.5	2	2	18.5
Hexan	1.5	50	2	3.5
Hexan	1.5	100	2	2.5
Hexan	1.5	200	2	1.5

dass der Emissionsgrad der Flammen nicht bekannt sein muss. Da es über Emissionsgrade von großen Peroxid-Poolfeuern bislang keine Erkenntnisse gibt, wird dieser Methode der Vorzug, vor einer Messung mittels IR-Kamera gegeben.

Zusätzlich wird die SEP mit einer IR-Kamera SC 650 der Fa. Flir bestimmt. Dabei handelt es sich um ein Mikrobolometer, welches im Wellenlängenbereich  $7.5 \mu\text{m} \lesssim \lambda 13.5 \mu\text{m}$  arbeitet. Die geometrische Auflösung der Kamera betrug  $640 \times 480$  Pixel, wobei eine Messung mit einer zeitlichen Auflösung von 50 Hz möglich war. Von der Infrarotkamera wurden zunächst Thermogramme in Graustufen erzeugt, welche anschließend durch Falschfarben-Darstellung gewandelt wurden. Bei einem Mikrobolometer handelt es sich um einen ungekühlten Infrarotdetektor, der durch thermoelektrische Kühler (Peltierelemente) auf einer konstanten Temperatur gehalten wird. Der Mikrobolometerarray besteht dabei aus einigen sehr dünnen, strahlungsempfindlichen Plättchen, aus einem Material mit einem stark temperaturabhängigen Widerstand. Die Absorption der einfallenden Infrarotstrahlung führt zu einer Temperaturerhöhung des Plättchens, was wiederum mit einer

Änderung des Widerstandes einhergeht, so dass der entstehende Spannungsabfall aufgezeichnet werden kann. Im genannten Wellenlängenbereich ist es möglich das Rußkontinuum zu messen. Da die Emission der Rußpartikel als groß gegenüber der Gasstrahlung durch  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  anzusehen ist, kann auf eine direkte Messung im Bereich der Gasbanden verzichtet werden.



## 4 CFD Simulation

Seit der Entwicklung der ersten CFD-Software ist die Verbrennungssimulation eine Zielanwendung. Aufgrund der geringen Rechenkapazitäten kamen damals nur ressourcenschonende Reaktionsmodelle, wie das Eddy-Dissipations-Modell, zum Einsatz. Durch kontinuierliche Weiterentwicklung der CFD-Software, sowie durch immer leistungsfähigere Rechner, ist heute auch eine Modellierung von nicht-Gleichgewichtsschemie und Mehrphasenströmungen möglich. Als Modellierung bezeichnet man die Abbildung, der infolge physikalischer und chemischer Prozesse hervorgerufenen Zustände oder Zustandsänderungen, mit Hilfe mathematischer Methoden. Die meisten strömungsmechanischen Problemstellungen sind zu komplex, um sie geschlossen analytisch lösen zu können, so dass numerische Lösungsmethoden erforderlich sind. Die numerische Strömungssimulation, oder engl. Computational Fluid Dynamics (CFD), beruht auf der Lösung der Erhaltungs- bzw. Transportgleichungen der Masse, des Impulses, der Energie und der verschiedenen Speziesmassen. Hierzu ist eine räumliche Diskretisierung des Bilanzgebietes durch ein Rechengitter notwendig, über welches eine Lösung der Bilanzgleichungen mit Hilfe arithmetischer Operationen möglich ist, wobei sich besonders iterative Methoden (schrittweise Annäherung der Lösung) bewährt haben. Hierzu sind auch genau definierte Startwerte für den ersten Durchlauf und auch die Festlegung von Randbedingungen für die Grenzen des Bilanzgebietes notwendig.

Die numerische Strömungssimulation ist ein ideales Werkzeug zur Ergänzung experimenteller Untersuchungen, da lokale Aussagen über sämtliche zu berechnenden Größen im gesamten Bilanzgebiet gemacht werden können, auch in Bereichen, die aus geometrischen oder sicherheitstechnischen Gründen gar keine Messungen zulassen. Zudem ist mit wenig Aufwand eine Variation der Randbedingungen und eine Änderung der Geometrie möglich. Trotz der großen Fortschritte auf dem Gebiet der CFD bildet das Experiment weiterhin die Grundlage aller wissenschaftlichen Untersuchungen und auch Simulationsergebnisse müssen anhand experimenteller Daten validiert werden. Numerische Lösungen beinhalten stets drei systematische Fehlerquellen [101]:

- Modellfehler, definiert als die Differenz zwischen dem aktuellen Strömungsfeld und der exakten Lösung des mathematischen Modells;
- Diskretisierungsfehler, definiert als die Differenz zwischen der exakten Lösung der Erhaltungsgleichung und der exakten Lösung des algebraischen Gleichungssystems;

- Konvergenzfehler, definiert als die Differenz zwischen der iterativen und der exakten Lösung des algebraischen Gleichungssystems.

## 4.1 Erhaltungsgleichungen

### Kontinuitätsgleichungen

Zuerst soll die Erhaltungsgleichung für die Masse der Spezies  $i$  des im Ort fixierten Kontrollvolumens (Abb. 4.1) gezeigt werden [102–104]. Dabei sind die Regionen innerhalb des Volumens  $V$  die “Minus-Regionen” und die Regionen außerhalb des Volumens  $V$  die “Plus-Regionen”. Der Anstieg an Masse der Spezies  $i$  im Volumen  $V$  durch die Oberfläche  $S$  ergibt sich durch Konvektion, Diffusion und infolge chemischer Reaktion:

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \rho_i dV}_{\text{Akkumulation}} = - \underbrace{\int_S (\hat{n} \rho_i \vec{u}) dS}_{\text{Konvektion}} - \underbrace{\int_S (\hat{n} j_i) dS}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\int_V \tilde{M}_i r_i dV}_{\text{Reaktion}} . \quad (4.1)$$

Auf der linken Seite von Gl. 4.1 kann aufgrund des festen Volumens die Ableitung nach der Zeit in das Integral gezogen werden. Die zwei Oberflächenintegrale auf der rechten Seite werden unter Nutzung des Gaußschen Integralsatzes, in Volumenintegrale überführt:

$$\int_V \frac{d}{dt} \rho_i dV = - \int_V (\nabla \rho_i \tilde{u}) dV - \int_V (\nabla j_i) dV + \int_V \tilde{M}_i r_i dV . \quad (4.2)$$

Da es sich um ein frei wählbares Kontrollvolumen handelt, können die Integralzeichen entfernt werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_i = -(\nabla \rho_i \tilde{u}) - (\nabla j_i) + \tilde{M}_i r_i , \text{ mit } i = 1, 2, \dots, N . \quad (4.3)$$

Bei Gl. 4.3 handelt es sich um die Erhaltungsgleichung der Speziesmassen. Werden alle  $N$ -Gleichungen genutzt, kann durch Einsetzen der Relationen  $\sum_i \rho_i = \rho$ ,  $\sum_i j_i = 0$  und  $\sum_i \tilde{M}_i r_i = 0$  die Kontinuitätsgleichung des Fluids erhalten werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -(\nabla \rho \tilde{u}) . \quad (4.4)$$

Die Massenstromdichte  $j$  ergibt sich nach dem 1. Fickschen Gesetz und ist nur für binäre Systeme gültig:

$$j = -\rho D_i \nabla w_i . \quad (4.5)$$

Bei Verbrennungsprozessen mit verdünnten Gasgemischen kann aber auch ein einheitlicher Diffusionskoeffizient für alle Spezies angenommen werden. Für den Diffusionskoeffizienten gilt  $D \sim T^{\frac{3}{2}}$  und  $D \sim 1/p$ , wodurch der Diffusionskoeffizient sowohl von der Temperatur als auch vom Druck abhängig ist. Bei Verbrennungsprozessen kann die Thermodiffusion (Soret-Effekt, Diffusion von Masse aufgrund eines Temperaturgradienten), die nur bei sehr leichten und sehr schweren Teilchen eine Rolle spielt sowie die Druckdiffusion (Diffusion von Masse aufgrund eines Druckgradienten) vernachlässigt werden [8].

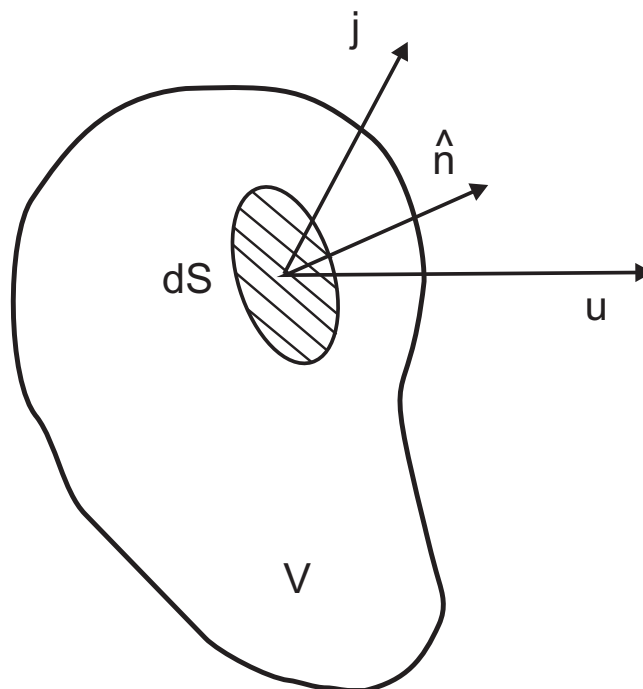


Abb. 4.1: Kontrollvolumen  $V$  mit einer Oberfläche  $S$ , dem Normalenvektor  $\hat{n}$ , der Massenstromdichte  $j$  und der massen-gemittelten Fluidgeschwindigkeit  $u$  [102]

### Impulserhaltung

Der Impuls ändert sich mit der Zeit durch molekulare Prozesse, Konvektion und durch externe Kräfte, die auf eine individuelle Spezies wirken:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \tilde{u} dV = - \int_S (\hat{n} \rho \tilde{u}) dS + \int_S (\hat{n} \bar{\sigma}) dS + \int_V \sum_i \rho_i g_i dV \quad . \quad (4.6)$$

Analog zur Kontinuitätsgleichung, können auf der linken Seite der Gl. 4.6 der Operator der zeitlichen Ableitung in das Integral geschrieben sowie die

Oberflächen-Integrale auf der rechten Seite durch den Gaußschen Integralsatz in Volumenintegrale überführt werden. Durch die freie Auswahl des Kontrollvolumens können nun wiederum die Integralzeichen entfernt werden, woraus sich die Bewegungsgleichung für das Fluid ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{u} = -(\nabla \rho \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}) + (\nabla \bar{\bar{\sigma}}) + \sum_i \rho_i \mathbf{g}_i \quad . \quad (4.7)$$

Wenn die Kräfte, die auf die einzelnen Spezies wirken, als gleich angenommen werden können, vereinfacht sich der letzte Term in  $\rho \mathbf{g}$ . Dabei ist  $\mathbf{g}_i$  die Kraft pro Masseneinheit, die auf die Spezies  $i$  wirkt. Der Gesamt-Spannungs-Tensor  $\bar{\bar{\sigma}}$  beruht auf dem empirisch ermittelten Zusammenhang:

$$\bar{\bar{\sigma}} = -p \bar{\bar{\mathbf{E}}} + \bar{\bar{\tau}} \quad . \quad (4.8)$$

Der hydrostatische Anteil des Gesamt-Spannungs-Tensors  $\bar{\bar{\sigma}}$  wird durch den hydrostatischen Druck  $p$  und den Einheitsvektor  $\bar{\bar{\mathbf{E}}}$  beschrieben. Der zweite Term  $\bar{\bar{\tau}}$  beschreibt den viskosen Anteil, wobei sich für verdünnte Gase der folgende Zusammenhang ergibt:

$$\bar{\bar{\tau}} = -\eta \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) + \left( \frac{2}{3} \eta - \kappa \right) (\nabla \mathbf{u}) \bar{\bar{\mathbf{E}}} \quad . \quad (4.9)$$

Das hochgestellte  $T$  drückt dabei aus, dass es sich um den transponierten Tensor handelt, der durch Vertauschung von Zeilen und Spalten entsteht. Weiterhin treten zwei stoffspezifische Koeffizienten auf, wobei  $\eta$  die dynamische Viskosität und  $\kappa$  die Volumenviskosität repräsentieren. Die Volumenviskosität beschreibt die Reibungskräfte, die bei der Exposition eines Fluids auftreten und durch Relaxationseffekte zwischen inneren Freiheitsgraden und der Translation zu begründen sind. Die Temperaturabhängigkeit der dynamischen Viskosität von Gasen kann mit dem Sutherland-Modell, mit den zwei stoffspezifischen Modellkonstanten  $A_1$  und  $A_2$ , beschrieben werden:

$$\eta = \frac{A_1 T^{\frac{3}{2}}}{T + A_2} \quad . \quad (4.10)$$

## Energieerhaltung

Zuletzt wird noch die Erhaltung der Energie im Kontrollvolumen  $V$  beschrieben, die auf den 1. Hauptsatz der Thermodynamik zurückgeht. Die spezifische innere Energie  $e$  ist dabei die Summe der kinetischen Energie aller Bestandteile und die Summe der Energien aller intermolekularen Wechselwirkungen. Die



kinetische und innere Energie im Kontrollvolumen  $V$  ändert sich wenn Arbeit durch Bewegung des Fluids an der Oberfläche  $S$  geleistet wird, wie etwa durch Wärmeleitung oder durch externe Kräfte, die auf das Fluid wirken:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \left( \frac{1}{2} \rho \tilde{u}^2 + \rho e \right) dV = & - \int_S \left( \hat{n} \left( \frac{1}{2} \rho \tilde{u}^2 + \rho e \right) \tilde{u} \right) dS - \int_S (\hat{n} q) dS \\ & + \int_S \left( \hat{n} (\bar{\sigma} \tilde{u}) \right) dS + \int_V \sum_i ((j_i + \rho_i \tilde{u}) g_i) dV \quad . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Wiederum wird der Operator der zeitlichen Ableitung in das Integral geschrieben und die Oberflächen-Integrale in Volumen-Integrale umgewandelt und anschließend die Integralzeichen entfernt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho \tilde{u}^2 + \rho e \right) = - \left( \nabla \left( \frac{1}{2} \rho \tilde{u}^2 + \rho e \right) \tilde{u} \right) - (\nabla q) + (\nabla (\bar{\sigma} \tilde{u})) + \sum_i ((j_i + \rho_i \tilde{u}) g_i) . \quad (4.12)$$

Wenn die Kräfte, die auf die einzelnen Spezies wirken, als gleich angenommen werden können, vereinfacht sich der letzte Term in  $\tilde{u} \rho g$ . Zudem ist bei Verbrennungsprozessen die Einführung eines Fernwirkungstermes für Wärmestrahlung  $q_r$  sinnvoll. Nach dem Zusammenhang  $h = e + \frac{p}{\rho}$  läßt sich eine Erhaltungsgleichung für die spezifische Enthalpie aufstellen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho \tilde{u}^2 + \rho h - p \right) = - \left( \nabla \left( \frac{1}{2} \rho \tilde{u}^2 + \rho h - p \right) \tilde{u} \right) \quad (4.13)$$

$$- (\nabla q) + (\nabla (\bar{\sigma} \tilde{u})) + \sum_i ((j_i + \rho_i \tilde{u}) g_i) + \nabla q_{\text{rad}} \quad (4.14)$$

; .

Hierin ist  $q$  die Wärmestromdichte nach dem Fourierschen Gesetz, die sich wie folgt zusammensetzt:

$$q = -\lambda \nabla T + \sum_i h_i j_i \quad . \quad (4.15)$$

Darin ist  $\lambda$  der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient,  $T$  die Temperatur und  $h$  die spezifische Enthalpie. Der Transport von Energie entlang eines Konzentrationsgradienten (Dufour-Effekt) ist bei Verbrennungsprozessen vernachlässigbar klein und wird daher nicht berücksichtigt. Zudem können die Druckterme bei auftriebsbestimmten Flammen vernachlässigt werden [8].

## 4.2 Turbulenzmodellierung

Die meisten technischen Problemstellungen sind turbulent, was sich in einem scheinbar zufälligen, irregulären und chaotischen Verhalten äußert, welches immer dann auftritt, wenn die nicht-linearen konvektiven Kräfte im Vergleich zu den viskosen Kräften einen Schwellenwert ( $Re_{krit}$ ) überschreiten [8, 10]. Unterhalb der kritischen Reynoldszahl findet eine Dämpfung entstehender Instabilitäten durch viskose Einflüsse statt. Eine erhöhte Diffusivität, Viskosität und Wärmeleitfähigkeit sind wichtige Eigenschaften turbulenter Strömungen. Oftmals erlaubt erst die Turbulenz eine gute Vermischung und Verbrennung. Typisch für das Auftreten von Turbulenz sind ihre räumlich dreidimensionalen Wirbelstrukturen, welche Rotations-Wirbelfäden entstehen lassen, wobei die großen instabilen Wirbel wieder kleinere Wirbel hervorrufen. Die turbulenten Prozesse laufen auf verschiedenen Längenskalen ab, wobei die größte Längenskala den geometrischen Abmessungen des Systems (integrales Längenmaß  $l_{int}$ ) entspricht. Durch Störungen zerfallen die großen Wirbel unter Bildung kleinerer Wirbel in Form einer Energiekaskade. Diese Energiekaskade endet mit der Dissipation der kinetischen Energie in sehr kleine Wirbel (Kolmogorov-Längenmaß  $l_{kol}$ ) durch Reibungskräfte in thermische Energie. Anhand eines turbulenten Energiespektrums kann die Verteilung der kinetischen Energie auf den verschiedenen Längenskalen des Gesamtprozesses dargestellt werden:

$$q(\tilde{r}, t) = \int_0^{\infty} e(\tilde{\nu}; \tilde{r}, t) d\tilde{\nu} \quad . \quad (4.16)$$

Hiermit wird die Abhängigkeit der mittleren spezifischen turbulenten Energie  $k$  von der Wellenzahl  $\tilde{\nu}$  durch die spektrale Energiedichte  $e(k)$  (Abb. 4.2) beschrieben. Das Energiespektrum beginnt beim integralen Längenmaß  $l_{int}$  und endet bei der Kolmogorov-Länge  $l_{kol}$ , unter der die Diffusion schneller als der turbulente Transport ist. Zweckmäßigerweise wird zur Beschreibung des Turbulenzgrades eine Turbulenz-Reynoldszahl eingeführt, die von der Geometrie unabhängig ist:

$$Re_t = \frac{\bar{\rho} \sqrt{2q} l_{int}}{\bar{\eta}} \quad . \quad (4.17)$$

Mit Hilfe der Turbulenz-Reynoldszahl lässt sich die Kolmogorov-Länge  $l_{kol}$  berechnen:

$$l_{kol} = \frac{l_{int}}{Re_t^{\frac{3}{4}}} \quad . \quad (4.18)$$

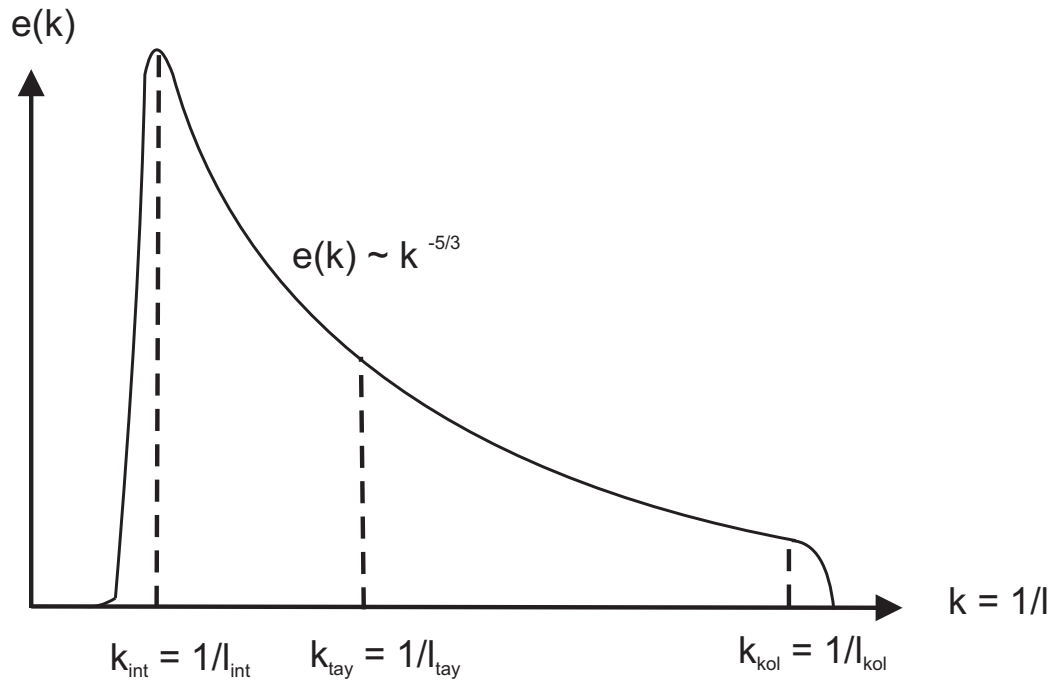


Abb. 4.2: Turbulentes Energiespektrum:  $l_{\text{int}}$  symbolisiert das integrale Längenmaß [8]

### 4.2.1 Direkte Numerische Simulation

Die im vorherigen Abschnitt erläuterten Erhaltungsgleichungen sind auch in turbulenten Systemen gültig, solange das turbulente Längenmaß groß gegenüber den intermolekularen Abständen ist, was in Verbrennungsprozessen bei Atmosphärendruck erfüllt ist [8, 105]. Die Direkte Numerische Simulation (DNS) ist zwar die akkurateste Realisierung einer Strömung, liefert aber auch eben nur diese eine Realisierung. Bei homogener, isotroper Turbulenz wird zumeist die Pseudo-Spektral-Methode angewandt. Dabei müssen alle relevanten Skalen räumlich und zeitlich aufgelöst werden. Die untere Grenze der Kantenlänge des Simulationsgebietes ist achtmal die integrale Längenskala, wobei sich die Abmessung der Zellen des Rechengitters nach dem folgenden Zusammenhang ergibt:

$$\frac{\Delta x}{l_{\text{kol}}} = \frac{\pi}{1.5} \approx 2.1 \quad . \quad (4.19)$$

Auch der Zeitschritt  $\Delta t$  der Rechnung ist limitiert durch die numerische Genauigkeit und ist durch die Courant-Zahl gegeben:

$$\text{Cr} = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \approx 0.05 \quad . \quad (4.20)$$

Nachteilig erweist sich der hohe Rechenaufwand, der mit  $Re_t^3$  ansteigt, was eine DNS nur bei niedrigen  $Re_t$ -Zahlen möglich macht. Daher existieren verschiedene andere Ansätze für hohe  $Re$ -Zahlen bei denen kleine oder große Längenskalen nicht mehr direkt gelöst werden.

### 4.2.2 Wirbelviskositäts-Modelle

Die wesentliche Aufgabe eines Turbulenzmodells ist die Bereitstellung turbulenter Längen- und/oder Zeitskalen [9, 106]. Über die turbulenten Skalen lässt sich die Wirbelviskosität berechnen, welche die Grundlage zur Schließung offener Terme der gemittelten Bilanzgleichung bildet. Hierzu sind viele Ansätze bekannt, die sich nach der Anzahl der zu lösenden Transportgleichungen gliedern lassen.

#### Null-Gleichungs-Modelle

Die ältesten Ansätze zur Turbulenzmodellierung kommen ohne Transportgleichungen aus, wobei sich die Wirbelviskosität  $\eta_t$  direkt aus den Strömungsvariablen ergibt. Das erste erfolgreiche Modell dieser Art geht auf die Mischungslängentheorie von Prandtl zurück [107]. Hieraus ergibt sich für die Wirbelviskosität eine Abhängigkeit vom Wandabstand  $y$ :

$$\eta_t = l_0^2 \left| \frac{du_x}{dy} \right| \quad . \quad (4.21)$$

Wichtige Vertreter dieser Klasse sind das Cebici-Smith-Modell [108] und das Baldwin-Lomax-Modell [109].

#### Ein-Gleichungs-Modelle

Die Ein-Gleichungsmodelle basieren auf der allgemeinen Form:

$$\eta_t = \sqrt{k} l_0 \quad . \quad (4.22)$$

Dabei wird die turbulente kinetische Energie  $k$  durch eine separat modellierte Transportgleichung berechnet, wobei sich die turbulente Längenskala aus speziellen empirischen Werten ergibt. Solche Modelle wurden von Kolmogorov [110] und Prandtl/Wieghardt [111] entwickelt.

Durch neuere Forschung von Baldwin/Barth [112] sowie Spalart/Almaras [113] konnten Modelle entwickelt werden, bei denen eine Transportgleichung direkt für die Wirbelviskosität  $\eta_t$  gelöst wird. Diese Modelle besitzen einen Abbruchterm in Abhängigkeit des Abstandes zur nächsten Wand und sind insbesondere für aerodynamische Probleme geeignet.

## Zwei-Gleichungs-Modelle

Heute werden vielfach Zwei-Gleichungs-Modelle zur Bestimmung der Wirbelviskosität genutzt, bei denen neben den gemittelten Erhaltungsgleichungen noch zwei weitere partielle Differentialgleichungen gelöst werden. Häufig wird das  $k - \epsilon$ -Modell verwendet, bei dem eine Gleichung für die turbulente kinetische Energie  $k$  und eine Gleichung für die Dissipationsgeschwindigkeit  $\epsilon$  gelöst wird, aus denen die Längenskala  $l = \frac{k^{3/2}}{\epsilon}$ , eine Zeitskala  $t = \frac{k}{\epsilon}$  und die turbulente Geschwindigkeit  $u_t = k^{1/2}$  berechnet werden kann<sup>1</sup> [114, 115]. Zur Schließung des Gleichungssystemes genügen zwei Turbulenzvariablen, die aber nicht unweigerlich  $k$  und  $\epsilon$  sein müssen. Weitere oft verwendete Turbulenzvariablen sind  $\omega = \frac{\epsilon}{k}$ , die Frequenz der energieeintragenden Wirbel, im  $k - \omega$ -Modell [116] sowie auch  $\tau = \frac{1}{\omega}$ ,  $l = k^{3/2}/\epsilon$  und  $kl = k^{5/2}/\epsilon$ . Unterschiede können sich insbesondere in Grenzschichten bemerkbar machen. Während das  $k - \omega$ -Modell den Verlauf der Turbulenz in den Grenzschichten in denen der Einfluss der Viskosität hoch ist besser wiedergibt, liegt die Stärke des  $k - \epsilon$ -Modelles im Bereich der Kernströmung. Auch vom  $k - \omega$ -Modell existieren verschiedene Abwandlungen, um das Modell auf die gegebenen Bedingungen abzustimmen.

## Weitere Modelle

Beim  $k - kl - \omega$ -Modell werden drei Transportgleichungen gelöst [117]. Dieses Modell wird zur Beschreibung der Entwicklung von Grenzschichten genutzt, wobei der Wechsel von einem laminaren zu einem turbulenten Strömungsfeld mit geringer Rechenleistung gut wiedergegeben werden kann.

Um die Vorteile des  $k - \epsilon$ -Modelles und  $k - \omega$ -Modelles miteinander zu vereinigen, entwickelte Menter [118], das sogenannte Shear-Stress Transport (SST)  $k - \omega$ -Modell, welches in den Grenzschichten das Verhalten, des  $k - \omega$ -Modelles in der Kernströmung das des  $k - \epsilon$ -Modelles, wiedergibt. Hierzu ist es notwendig vier Transportgleichungen zu lösen.

## Reynolds-Spannungs-Modelle

Das Reynolds-Spannungs-Modell (RSM) basiert nicht mehr auf der Wirbelviskositätsannahme [105, 119–121]. Es werden Transportgleichungen für den Reynolds-Spannungstensor gelöst. Auch in den exakten Transportgleichung sind einige Terme unbekannt, so dass immer noch Annahmen zur Schließung gemacht werden müssen. Dennoch ist das RSM genauer als die Ein-Gleichungs- und

<sup>1</sup>Die Gleichungen für die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsgeschwindigkeit sind modelliert und entsprechen nicht den korrekten physikalischen Beziehungen

Zwei-Gleichung-Modelle, insbesondere bei komplexen Strömungen mit Wirbeln, Rotationen und schnellen Änderungen der Geschwindigkeitsfelder, da anisotrope Strömungen richtig wiedergegeben werden können.

### 4.2.3 Detached Eddy-Simulation

Die Detached-Eddy-Simulation (DES) wurde auf Grund der Schwierigkeiten mit der Large-Eddy-Simulation (LES) im Bereich hoher Re-Zahlen und wandbegrenzten Strömungen entwickelt, wie sie im Bereich der Aerodynamik üblich sind [122]. Dabei findet im Bereich der Grenzschichten eine Behandlung mit einem RANS-Modell statt, während auf den restlichen Bereichen eine Large-Eddy-Simulation angewandt wird. Die Kernströmung mit den großen instationären Turbulenz-Skalen wird durch die LES wiedergegeben. Im wandnahen Bereich greift das RANS-Modell, da eine genaue Auflösung des wandnahen Bereiches mittels LES einen nicht zu leistenden Aufwand an Rechenleistung nach sich zieht. Es handelt sich somit um ein Hybrid-Modell aus LES und RANS. Theoretisch kann zur DES jedes RANS-Modell genutzt werden, welches turbulente Längen- und Zeitskalen zur Verfügung stellt, praktische Anwendung finden aber nur das Spalart-Almaras-Modell, das Realizable  $k - \epsilon$ -Modell und das SST  $k - \omega$ -Modell.

### Large-Eddy Simulation

Bei der Large-Eddy-Simulation (LES) werden die großen, dreidimensionalen und instationären Bewegungen direkt simuliert, wohingegen der Einfluss der kleineren Bewegungen durch ein RANS-Turbulenzmodell wiedergegeben wird [123]. Die zu erwartende Rechenzeit liegt zwischen der des Reynolds-Spannungs-Modells und der einer DNS. Da die zu erwartende Rechenzeit eine DNS im Bereich hoher Re-Zahlen unmöglich macht, ist die Large-Eddy-Simulation zwar rechenzeitintensiver als das Reynolds-Spannungsmodell-Modell, liefert aber exaktere und besser reproduzierbare Ergebnisse [105]. Der erste konzeptionelle Schritt der LES ist ein räumlicher Filterprozess der jede Größe  $\phi$  des Strömungsfeldes analog der Reynolds-Zerlegung in zwei Räume, den Fourier-(Wellenzahlen-Raum) und den Physikalischen-Raum unterteilt:

$$\phi = \underbrace{\hat{\phi}}_{\text{Grobstruktur}} + \underbrace{\phi^{\parallel}}_{\text{Feinstruktur}} . \quad (4.23)$$

Der Filter ist nicht implizit im Modell vorgegeben, sondern kann explizit vom Nutzer eingestellt werden. Abweichend von der Re-Zerlegung gilt aber immer:

$$\overline{\phi^{\parallel}} \neq 0 . \quad (4.24)$$

Die generelle Filteroperation ist definiert als:

$$\hat{\phi} = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*, \Delta) \phi(\mathbf{x}^*) d^3\mathbf{x}^* \quad , \quad (4.25)$$

wobei die Filterfunktion  $G(\mathbf{r}, \mathbf{x})$  über das gesamte Gebiet normalisiert ist:

$$\int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*, \Delta) d^3\mathbf{x}^* = 1 \quad . \quad (4.26)$$

In der Filterfunktion steht  $\mathbf{x}$  für den Ortsvektor an dem der gefilterte Wert für die Größe  $\phi$  bestimmt werden soll, wohingegen  $\mathbf{x}^*$  alle Ortsvektoren in der Umgebung von  $\mathbf{x}$  durchläuft.  $G$  gibt somit an, welchen Einfluss die lokalen Wert von  $\phi$  an der Stelle  $\mathbf{x}^*$  auf den gefilterten Wert an der Stelle  $\mathbf{x}$  haben. Ist nun der Abstand zwischen  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{x}^*$  kleiner als die Filterweite, so wird  $\phi(\mathbf{x}^*)$  in die Berechnung von  $\hat{\phi}$  einbezogen.

Gewöhnlich wird für die Filterfunktion  $G$ , in kontinuierlichen Verteilungen, ein Gauß-Filter angewandt:

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*, \Delta) = \left( \frac{6}{\pi^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -6 \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|^2}{\Delta^2} \right) \quad . \quad (4.27)$$

Oft kommt auch der Box-Filter zum Einsatz (für  $i=1,2,3$ ):

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*, \Delta) = \frac{1}{8} \nabla^3 \quad \text{für } |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^*| \leq \Delta \quad , \quad (4.28)$$

oder

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*, \Delta) = 0 \quad \text{für } |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^*| > \Delta \quad . \quad (4.29)$$

Eine andere Art des Filters ist der Sharp-Spectral-Filter:

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*, \Delta) = \frac{1}{(\pi\Delta)^3} \prod_{i=1}^3 \frac{\sin[(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^*)/\Delta]}{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^*)/\Delta} \quad . \quad (4.30)$$

Während der Gauß-Filter sowohl im Physikalischen-Raum als auch im Wellenzahlen-Raum kompakt ist, ist der Box-Filter nur im Physikalischen-Raum kompakt, während der Sharp-Spectral-Filter, der alle Wellenzahlen-Moden über einer kritischen Wellenzahl  $\tilde{\nu}_c \equiv \frac{\pi}{\Delta}$  entfernt, nur im Wellenzahlen-Raum kompakt ist. Die Filterweite  $\Delta$  wird bei einer Finite-Volumen-Diskretisierung durch die Maschenweite des Gitters ( $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ ) festgelegt.

Wichtige Eigenschaften wie das Energiespektrum des Filters und dessen Auflösung, werden hier nicht weiter betrachtet. Es sei darauf hingewiesen, dass formal

ähnlich dem Reynolds-Ansatz ein neues System gefilterter Erhaltungsgleichungen entsteht:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{\bar{u}} = -\nabla \bar{\bar{u}} - \nabla \tau^r + \eta \nabla^2 \bar{\bar{u}} - \nabla \bar{p} + \rho g \quad . \quad (4.31)$$

Bei den neu entstandenen Erhaltungsgleichungen müssen auch wieder Terme, wie der Feinstrukturtensor  $\tau^r$  (formal ähnlich dem Reynolds-Spannungs-Tensor), modelliert werden. Diese Feinstrukturspannungen verschwinden wenn die Filterweite  $\Delta \rightarrow 0$  geht. Zur Schließung des Feinstruktur tensors wird ein lineares Wirbelviskositäts-Modell verwendet:

$$\tau^r = -2\eta_t \sqrt{\hat{\mathcal{S}}} \quad . \quad (4.32)$$

Die Wirbelviskosität ergibt sich dabei über die Mischungslängen-Hypothese, also aus einem Null-Gleichungs-Modell nach:

$$\eta_t = \rho l_s^2 \hat{\mathcal{S}} \quad . \quad (4.33)$$

Darin ist  $l_s = \min[\kappa d, C_s \Delta]$  die Smargorinsky-Länge, wobei  $\kappa$  die von Karman-Konstante und  $d$  den geringsten Abstand zur nächsten Wand darstellt.  $C_s = 0.17$  ist der Smargorinsky-Koeffizient mit der Filterbreite  $\Delta = V^{1/3}$ .  $\hat{\mathcal{S}}$  ist die gefilterte Dehnrate in Abhängigkeit der Geschwindigkeitsgradienten. Zudem gibt es die Möglichkeit, den Smargorinsky-Koeffizient dynamisch berechnen zu lassen (Dynamic Smargorinsky-Lilly-Modell) [124]. Hierzu wird ein zweiter Testfilter mit einer Filterbreite  $2\Delta$  eingeführt. Anhand der zwischen den beiden Filtern auftretenden Skalen wird dann der Smargorinsky-Koeffizienten dynamisch angepasst.

Alle bislang beschriebenen Submodelle obliegen der Annahme, dass die in das Submodell übergehende Energie mit der tatsächlich dissipierten Energie im Gleichgewicht steht. Um dieser Annahme zu entgehen, kann die turbulente kinetische Energie zwischen den beiden Räumen durch das Lösen einer Transportgleichung bestimmt werden.

### 4.3 Verbrennungsmodelle

Ein universelles numerisches Verfahren zur Verbrennungssimulation für alle Anwendungsbereiche und Rechenarchitekturen ist nicht realisierbar. Abgesehen von der DNS kommen somit zur Problematik der Strömungsberechnung noch die des Verbrennungsmodells da eine genaue Beschreibung der Kinetik bei den meisten Brennstoffen zu großen Reaktionsmechanismen mit zahlreichen Komponentengleichungen führt. Die wesentlichen Hindernisse einer numerischen Simulation einer turbulenten Verbrennung sind die Beschreibung der Wechselwirkung turbulenter Fluktuation mit der chemischen Kinetik und die hohe Anzahl



an relevanten chemischen Komponenten. Hier ist auch der Ansatzpunkt der meisten Verbrennungsmodelle, deren Ziel eine möglichst genau Approximation des Verbrennungsablaufes mittels weniger Variablen ist. Die Verbrennungsmodellierung stellt die Beschreibung des chemischen Quellterms der Spezieserhaltungsgleichung dar. Hierzu existieren verschiedene Modellvorstellungen, die mit einer unterschiedlich großen Rechenleistung verknüpft sind.

### 4.3.1 Flammen mit unendlich schneller Chemie

#### Brutto-Reaktionsmodell und Flame-Sheet-Modelle

Ausgangspunkt dieser Modellvorstellungen ist eine einzige, irreversible Brutto- oder Globalkinetik, für die  $\text{Brennstoff} + \text{Oxidator} \rightarrow \text{Produkt}$  gilt. Auf eine detaillierte chemische Kinetik wird dagegen verzichtet. Ergänzend kommt beim Flame-Sheet Modell ein unendlich schneller Reaktionsverlauf hinzu, wodurch Brennstoff und Oxidator an einem Ort nicht gleichzeitig vorkommen können [9, 125]. Durch das Fehlen von Zwischenprodukten ist der Verbrennungsablauf und die Schadstoffbildung nicht berechenbar. Auch die Position der Flamme kann oft nur sehr ungenau wiedergegeben werden. Die Stärke dieses Modells liegt in der einfachen Wiedergabe der Energiefreisetzung unter der Annahme eines vollständigen Abbrandes.

#### Eddy-Breakup- und Eddy-Dissipations-Modell

Das Eddy-Breakup-Modell (EBM) [9, 126, 127] für vorgemischte Flammen und als Erweiterung das Eddy-Dissipations-Modell (EDM) für nicht-vorgemischte Flammen [9, 128] gehen von einer sehr schnellen Chemie aus. Bei vorgemischten Flammen liegen Brennstoff und Oxidator in gleichen Wirbeln vor, die an Gebiete mit heißen Verbrennungsprodukten grenzen. Unter der Annahme einer schnellen Chemie wird die Geschwindigkeit des Verbrennungsablaufs durch die Geschwindigkeit des Zerfalls, von Paketen unverbrannten Brennstoffes, zu immer kleineren Wirbeln mit einer großer Grenzfläche bestimmt. Hierdurch wird die Kinetik unbedeutend und die turbulente Mischung genügt zur Beschreibung des Verbrennungsablaufes. Eine ähnliche Überlegung ist auch für nicht-vorgemischte Flammen möglich, da unter Annahme einer schnellen Chemie der Stofftransport (Mischung auf molekularer Ebene) und somit die Dissipationsrate zum geschwindigkeitsbestimmenden Schritt wird. Die Kinetik der Verbrennungsreaktion geht somit aus den mittleren Konzentrationen und den Turbulenzvariablen hervor. Unter der Annahme einer unendlich schnellen Chemie befindet sich das Gas im chemischen Gleichgewicht, wodurch die Zusammensetzung, unabhängig von der Zahl der Komponenten, nur noch von der Elementzusammensetzung sowie vom

Druck und der Temperatur ab.

### 4.3.2 Flammen mit endlich schneller Chemie

#### Konzept des Mischungsbruchs

Die Elementzusammensetzung in einem offenen System lässt sich über den Mischungsbruch charakterisieren. Analog zu den Massenbrüchen  $w_i$  lässt sich ein Elementmassenbruch  $Z_i$  definieren [8]:

$$Z_i = \sum_{j=1}^S \mu_{i,j} w_j \quad i = 1, \dots, M \quad . \quad (4.34)$$

Dabei gibt  $S$  die Anzahl der Stoffe und  $M$  die Anzahl der Elemente der betrachteten Stoffe wieder. Der Koeffizient  $\mu_{i,j}$  bezeichnet den Massenanteil des Elements  $i$  im Stoff  $j$ . Kann eine nicht-vorgemischte Flamme als Zweistromproblem betrachtet werden, lässt sich mit Hilfe der Elementmassenbrüche der Mischungsbruch  $\xi_i$  definieren:

$$\xi_i = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,br} - Z_{i,ox}} \quad . \quad (4.35)$$

Aus den Gln. 4.34 und 4.35 sowie Abb. 4.3 geht hervor, dass der Mischungsbruch auf lineare Weise mit den Massenbrüchen verknüpft ist. In den meisten Systemen können die Diffusionskoeffizienten der verschiedenen Spezies als gleich betrachtet werden, wodurch der Mischungsbruch zusätzlich unabhängig von der Wahl des betrachteten Elementes  $i$  wird.

#### PDF-Verfahren

Zur Erfassung turbulenter Strömungen bieten sich statistische Methoden an. In einem stochastischen System lassen sich für das Eintreten eines Folgezustands nur Wahrscheinlichkeiten angeben [129, 130]. Dabei ist jede stochastische Variable eines turbulenten Strömungsfelds eine Funktion des Orts sowie der Zeit und somit eine stochastische Funktion, deren statistische Informationen durch ein Wahrscheinlichkeitsdichtefunktional (probability density functional) beschrieben werden [131]. Eine Lösung des Wahrscheinlichkeitsdichtefunktional ist in der Praxis nicht möglich. Ist man hingegen nur an der statistischen Information einer Variable oder eines Variablenvektors interessiert, lässt sich die stochastische Funktion zur stochastischen Variablen und somit das Wahrscheinlichkeitsdichtefunktional zur Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF, probability density function) umwandeln. Zur Bestimmung der gemeinsamen PDF verschiedener Variablen, unter der Voraussetzung detaillierter Chemie und der Beschreibung aller quelltermrelevanten Größen, kommen zwei Verfahren in Frage [9]:

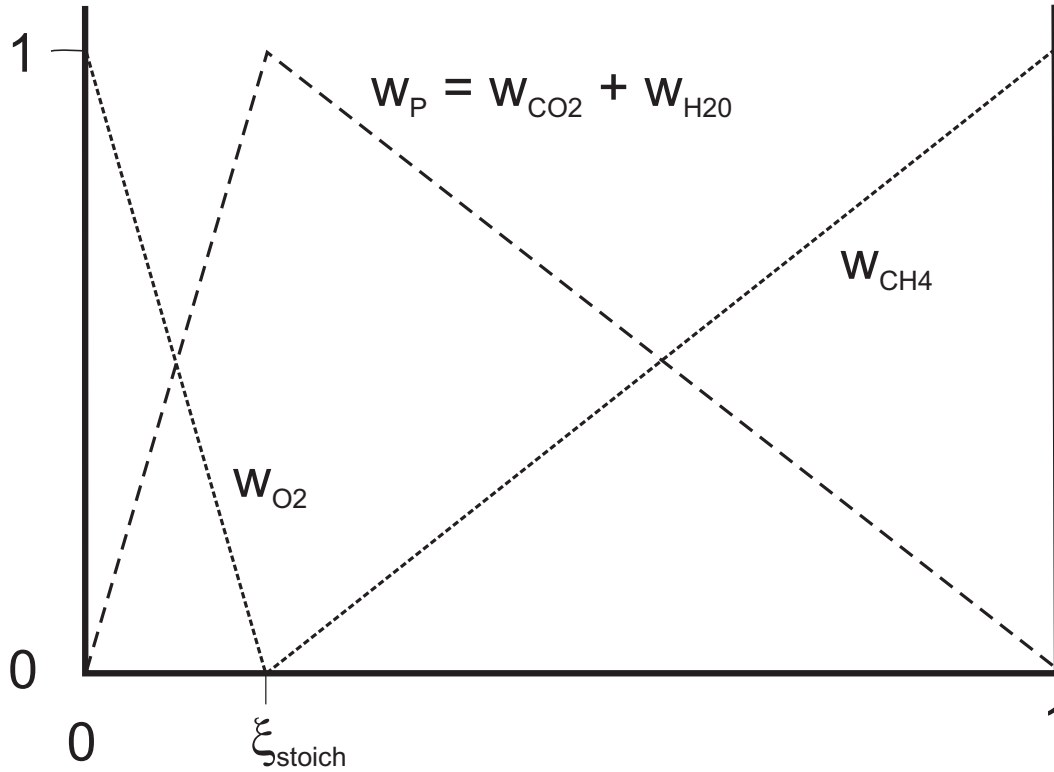


Abb. 4.3: Linearer Zusammenhang zwischen Mischungsbruch und Massenbrüchen für das Reaktionssystem Methan-Luft [8]

1. assumed-PDF-Verfahren (angenommene PDF)
2. Transportgleichungs-PDF-Verfahren

Mit  $P(\hat{u}; x, t)$  wird die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) einer Zufallsvariablen  $u$  bezeichnet, wobei  $P(\hat{u}; x, t) d\hat{u}$  die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der eine Zufallsvariable an einem Ort  $x$  zu einer Zeit  $t$  im Bereich  $d\hat{u}$  um  $\hat{u}$  ist:

$$P(\hat{u}) d\hat{u} \equiv \text{Prob}[\hat{u} \leq u < \hat{u} + d\hat{u}] \quad . \quad (4.36)$$

Die Beschreibung turbulenter Strömungen erfordert eine Vielzahl von Variablen, deren PDF eine Funktion des Zufallsvektors  $\Phi$  sind, was zu einer gemeinsamen PDF führt und der zu  $\Phi$  gehörende Zustandsraum mit  $\Psi$  bezeichnet wird:

$$P(\Psi) d\Psi \equiv \text{Prob}[\Psi \leq \Phi < d\Psi] \quad . \quad (4.37)$$

Um als PDF eingesetzt zu werden, muss eine Funktion die folgenden Voraussetzungen erfüllen [132]:

1. Ausschluss negativer Werte

$$P(\Psi) \geq 0 \quad . \quad (4.38)$$

2. Einhaltung der Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\Psi) d\Psi = 1 \quad . \quad (4.39)$$

3. Wahrscheinlichkeit null für  $\Psi \rightarrow \pm\infty$

$$\lim_{\Psi \rightarrow -\infty} P(\Psi) = \lim_{\Psi \rightarrow \infty} P(\Psi) = 0 \quad . \quad (4.40)$$

Darüber hinaus muss die PDF stückweise stetig sein und für  $\Psi \rightarrow \pm\infty$  muss  $\frac{\partial P}{\partial \Psi_\alpha} = 0$  gelten. Experimentell lässt sich die Wahrscheinlichkeit, dass  $u$  im Intervall zwischen  $\Delta\hat{u}$  und  $\hat{u}$  anzutreffen ist, im Falle einer statistisch stationären Strömung aus dem Zeitverlauf der Zufallsvariablen ermitteln:

$$P_E(\hat{u}) \Delta\hat{u} = \lim_{t_g \rightarrow \infty} \frac{1}{t_g} \sum_i \Delta t_i \quad . \quad (4.41)$$

Bei einer instationären Strömung lässt sich die PDF aus einer Vielzahl von Einzelrealisierungen gewinnen:

$$P_E(\hat{u}) \Delta\hat{u} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} \quad . \quad (4.42)$$

Wobei  $N_i$  die Anzahl der Realisierungen, in denen sich die Zufallsvariable im Bereich  $\Delta\hat{u}$  um  $\hat{u}$  befindet, bezeichnet.

Wenn die PDF einer Zufallsvariable bzw. eines Zufallsvektors bekannt ist, genügt sie, um die Zufallsvariable(n) an einem Ort zu einem Zeitpunkt vollständig zu beschreiben. Mit Hilfe von  $P$  lassen sich daher sowohl der Erwartungswert als auch die höheren Momente der Zufallsvariable(n) berechnen. Für den Erwartungswert gilt:

$$\langle u \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u} P(\hat{u}) d\hat{u} \quad . \quad (4.43)$$

Der Erwartungswert ist sowohl bei statistisch stationären wie auch instationären Vorgängen eindeutig definiert und somit auch allgemeingültiger als ein Gleichungssystem aus zeitlich gemittelten Größen. Liegt die gemeinsame PDF für

alle Quelltermvariablen (Dichte, Temperatur, Komponentenmasse, etc.) vor, ist darüber der Erwartungswert der chemischen Produktionsraten berechenbar.

Bei den assumed-PDF-Modellen ist die Struktur der PDF vorgegeben, wodurch sie sich nur noch eingeschränkt entfalten kann, wobei die Qualität der Lösung nun abhängig davon wird, wie genau die gewählte PDF die reale Verteilung approximiert [133–135]. Hierin liegt ein bedeutender Nachteil des assumed-PDF-Ansatzes, da zudem auch die chemische Reaktion keinen direkten Einfluss auf die PDF hat. Aufgrund des geringen Rechenaufwandes zur Berechnung des mittleren chemischen Quelltermes der Komponentengleichungen stellt das assumed-PDF-Modell, eine gute Alternative zum physikalisch genaueren PDF-Transportgleichungsmodell dar.

Die meisten Ansätze für angenommene PDF beruhen auf einfachen mathematischen Funktionen. Es kann gezeigt werden, dass bei hohen chemischen Umsatzraten der Einfluss der PDF-Struktur auf die Ergebnisse relativ gering ist.

Die Vorteile des assumed-PDF-Ansatzes lassen sich zusammenfassen [9]:

- der chemische Quellterm kann geschlossen werden
- der Rechenaufwand bleibt auch bei komplexen, dreidimensionalen Simulationen im vertretbaren Rahmen
- die Vorteile der hochentwickelten Momenten-Verfahren bleiben erhalten

Als Nachteile des assumed-PDF-Ansatzes sind zu nennen:

- die möglicherweise ungenaue Struktur der PDF
- meistens wird die statistische Unabhängigkeit einzelner Variablen vorausgesetzt
- der direkte Einfluss der physikalisch-chemischen Vorgänge auf die PDF wird vernachlässigt
- die Fehler in der Modellierung der ungeschlossenen Quellterme in den Transportgleichungen der Momenten-Verfahren

Die einfachste PDF ist die stetige Gleichverteilung, bei der eine eindimensionale Zufallsvariable, wie der Mischungsbruch  $\xi \in \mathbb{R}$  im Bereich  $[\xi_u, \xi_o]$ , einen konstanten Wert  $P(\hat{\xi}) = \gamma$  annimmt und außerhalb dieses Bereiches  $P(\hat{\xi}) = 0$  gilt. Eine Ergänzung der Gleichverteilung durch Delta-Impulse an den Begrenzungen ist möglich. Zur mathematischen Beschreibung bieten sich die Heaviside- und die

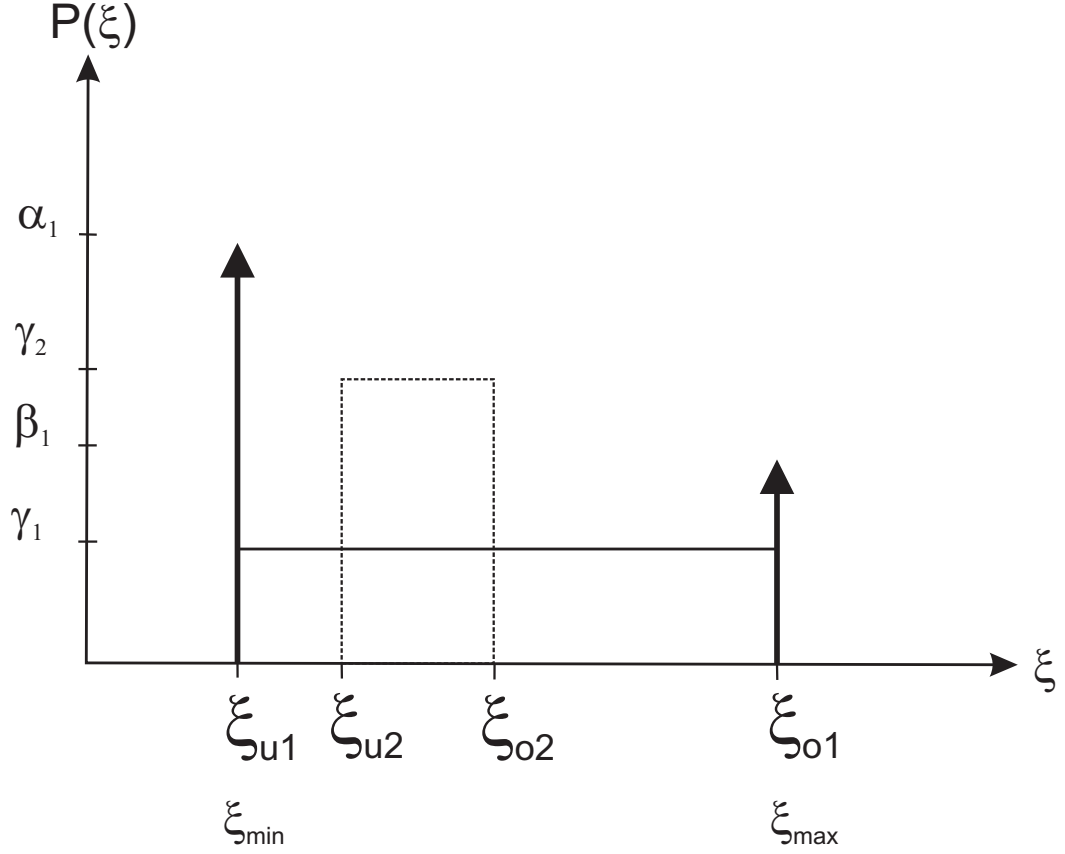


Abb. 4.4: Stetige Gleichverteilung mit (durchgezogen) und ohne (gestrichelt) Delta-Impulse an den Begrenzungen [9]

Delta-Funktion an (Abb. 4.4). Die Dirac'sche Delta-Funktion ist die Ableitung der Heaviside-Funktionen  $\delta(x) = dH(x)/dx$ . Für die Gleichverteilung mit und ohne Delta-Impuls ergibt sich:

$$P(\hat{\xi}) \equiv \alpha\delta(\hat{\xi} - \xi_o) + \beta\delta(\hat{\xi} - \xi_u) + \gamma[H(\hat{\xi} - \xi_u) - H(\hat{\xi} - \xi_o)] \quad . \quad (4.44)$$

Die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  geben die Stärke der Delta-Impulse an und  $\gamma$  den konstanten Wert der PDF. Zur Bestimmung der PDF müssen die physikalischen Grenzen  $\xi_u$ ,  $\xi_o$ , der Erwartungswert  $\bar{\xi}$  und dessen Varianz  $\overline{\xi'^2}$  bekannt sein, wodurch eine Berechnung der übrigen Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  möglich ist.

Die Flexibilität im Hinblick auf die Approximation realer Verteilungen macht den Einsatz einer  $\beta$ -PDF notwendig, da diese auch Randmaxima besitzt. Die  $\beta$ -PDF beruht auf der Gamma-Funktion:

$$\Gamma(\xi) \equiv \int_0^{\infty} x^{\xi-1} e^{-x} dx \quad . \quad (4.45)$$

Die  $\beta$ -PDF einer einzelnen, unabhängigen Variablen  $\xi \in [0, 1]$  ist gegeben durch:

$$P_{\xi}(\hat{\xi}) \equiv \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} \hat{\xi}^{\beta_1-1} (1 - \hat{\xi})^{\beta_2-1} \quad . \quad (4.46)$$

Dabei sind die notwendigen Parameter:

$$\beta_1 = \bar{\xi} \left[ \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi'^2} - 1 \right] \quad \text{und} \quad (4.47)$$

$$\beta_2 = (1 - \bar{\xi}) \left[ \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi'^2} - 1 \right] \quad . \quad (4.48)$$

Die  $\beta$ -Verteilung erfüllt alle notwendigen Eigenschaften einer PDF und ist aufgrund ihres Definitionsbereiches besonders zur Beschreibung von Massen- oder Molanteilen geeignet. Aufgrund der linearen Abhängigkeit lässt sich leicht eine Erhaltungsgleichung für den Mischungsbruch  $\xi$  definieren:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) = -\nabla(\rho u\xi) - \nabla(\rho D \nabla \xi) \quad . \quad (4.49)$$

Die Erhaltungsgleichung enthält keinen chemischen Quellterm, weswegen  $\xi$  auch eine skalare Erhaltungsgröße genannt wird. Um die Interaktion von Turbulenz und Chemie zu beschreiben, wird die Varianz des Mischungsbruches als Schließungsmodell verwendet, so dass auch die Transportgleichung für die Varianz des Mischungsbruches  $\overline{\xi'^2}$  gelöst werden muss. Dabei ergibt sich nach Mittelwertbildung und unter Verwendung des Diffusions-Gradientenansatzes:

$$\nabla(\overline{\rho u \xi'^2}) - \nabla(\eta_t \nabla \overline{\xi'^2}) = 2\eta_t \nabla^2 \bar{\xi} - \overline{2D \nabla \xi'^2} \quad . \quad (4.50)$$

Der Term  $\overline{2D \nabla \xi'^2}$  wird skalare Disipationgeschwindigkeit  $\chi$  genannt und gibt analog zur Dissipation von Geschwindigkeitsfluktuationen durch die viskose Dissipation die Dissipation der Fluktuation der Skalare an. Somit ist eine Beschreibung des Mischungsfeldes durch Berechnung des Mischungsbruchfeldes, wie in Abb. 4.5 gezeigt, möglich.

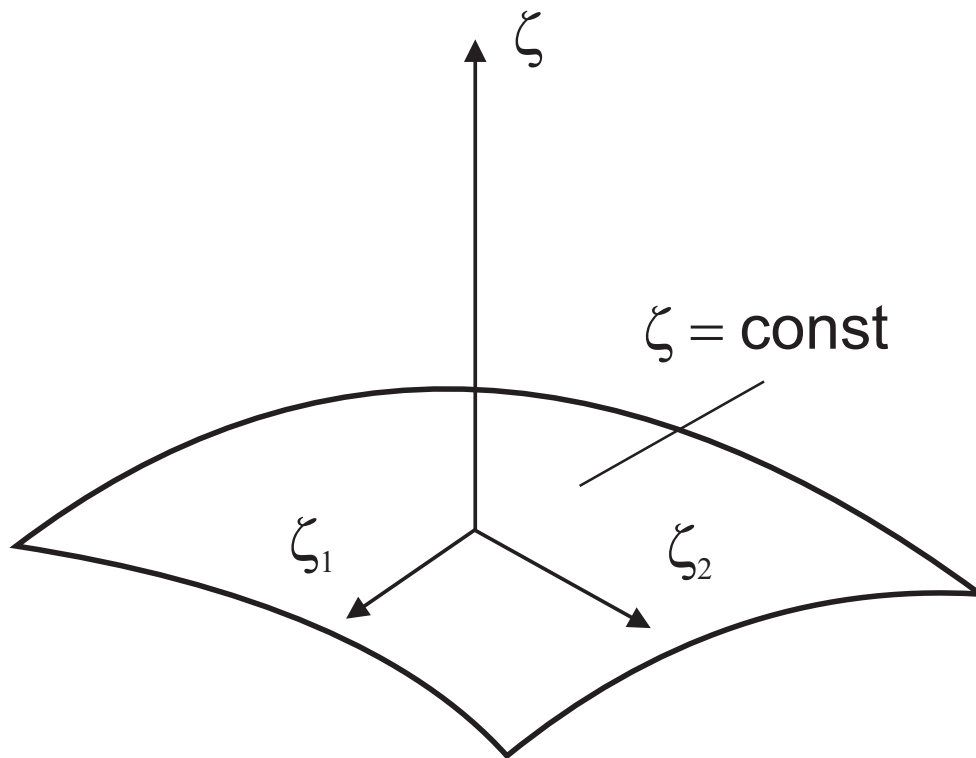


Abb. 4.5: Schematische Darstellung des Mischungsbruchfelds [10]

### Flamelet-Ansatz

Die Zeit- und Längenskalen der diffusionskontrollierten Flamme bestehen aus dem turbulenten Mischen und der Reaktionsgeschwindigkeit. Unter der Annahme, dass die Skala der Chemie wesentlich kleiner als die turbulente Skala ist, macht eine Separation der Skalen in Form von Flamelets möglich. Die Flamme ist dabei also eine dünne, schnellreagierende Struktur im Strömungsfeld. Die innere Struktur der Flamme beeinflusst das Strömungsfeld dabei nur unwesentlich. Auf der Skala der Flamme erscheinen die turbulenten Wirbel dagegen sehr groß, die durch die turbulente Strömung ausgeprägte Krümmung der Flammenkontur hat aber auf die innere Struktur keinen Einfluss (Abb. 4.6). Eine Kopplung beider Modellierungsebenen ist einfach. Durch die Separierung entstehen also drei Aufgaben [136, 137]:

1. Modellierung/Berechnung chemischer Prozesse.

Dabei wird die Flammenstruktur und die Bildung von Schadstoffen mit



komplexen Mechanismen, aber auch reduzierter Kinetik, unter Berücksichtigung des Zünd- und Löschverhaltens wiedergegeben.

## 2. Modellierung/Berechnung turbulenter Strömung

Diese findet auf Grundlage der Methoden der Strömungsmechanik statt, von denen einige hier bereits diskutiert wurden.

## 3. Kopplung beider Modellierungsebenen.

Zur mathematischen Herleitung der Flamelet-Gleichung wird zunächst die skalare Dissipationsgeschwindigkeit  $\chi = 2D\nabla\xi^2$  herangezogen, die ein Maß der Abweichung vom chemischen Gleichgewicht darstellt [138]. Die skalare Dissipationsgeschwindigkeit entspricht dabei dem Inversen einer diffusiven Zeit und charakterisiert die lokale Mischungsrate. Als entscheidender Parameter steht die Streckung der Flammenfront  $a$  mit der skalaren Dissipationsrate

### turbulente Wirbel

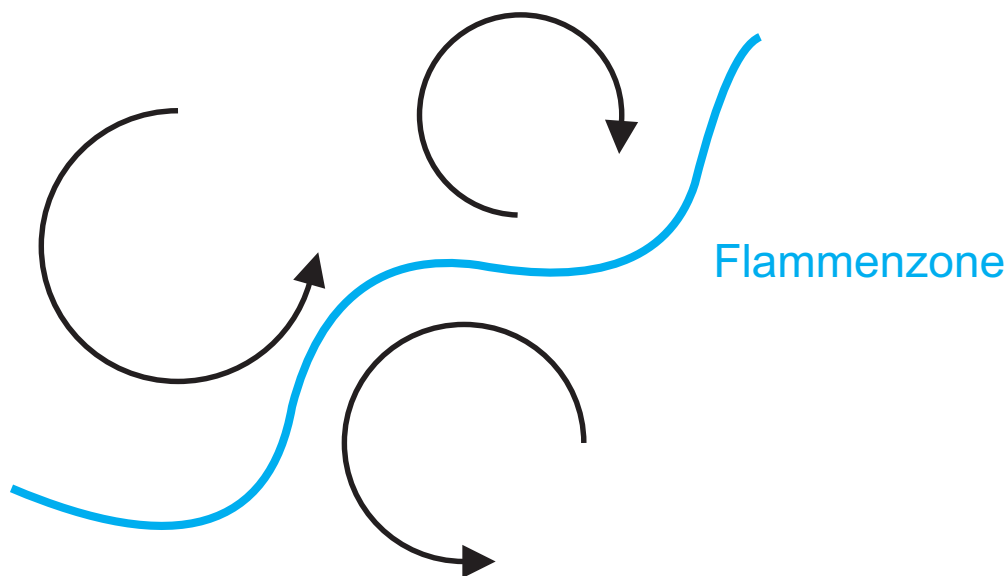


Abb. 4.6: Die Flamme als schnellreagierende Struktur im Strömungsfeld

in Verbindung. Die turbulente Flamme wird also als ein Ensemble vieler kleiner laminarer Flammen (Flamelets) angenähert, die alle die gleiche skalare Dissipationsgeschwindigkeit  $\chi$  haben. Der Mischungszustand kann über den Mischungsbruch als Funktion des Ortes und der Zeit ausgedrückt werden, so dass ein Koordinatensystem auf einem Oberflächenelement mit konstantem

Mischungsbruch eingeführt werden kann. Die Koordinate senkrecht dazu, steht als unabhängige Variable für den Mischungsbruch. Die Gültigkeit des Flamelet-Modells beruht auf drei Annahmen [136]:

1. Die Konzentrationen der Spezies sind eindeutige Funktionen des Mischungsbruchs.
2. Eine mehrdimensionale turbulente Flamme ist über viele eindimensionale, laminare Flamelets im Mischungsbruchraum beschreibbar.
3. Gleiche Diffusivität aller Spezies ( $Le = 1$ ).

Unter der Annahme eines festen Werts für die skalare Dissipationsgeschwindigkeit sind alle Massenbrüche der Komponentengleichungen, an jedem Ort, eindeutig eine Funktion des Mischungsbruchs<sup>2</sup>

$$w_i = w_i^{(F)}(\xi), \quad \frac{\partial}{\partial t} w_i = \frac{\partial}{\partial \xi} w_i^{(F)} \frac{\partial}{\partial t} \xi \quad \text{und} \quad \nabla w_i = \frac{\partial}{\partial \xi} w_i^{(F)} \nabla \xi \quad . \quad (4.51)$$

Unter Annahme des Diffusionsgradientenansatzes, ergeben sich durch Einsetzen in die Komponentengleichungen die Flamelet-Gleichungen:

$$-\rho D \nabla^2 \xi \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} w_i^{(F)} = M_i r_i \quad . \quad (4.52)$$

Um auf diesem Weg turbulente, nicht-vorgemischte Flammen zu simulieren, müssen die Erhaltungsgleichungen für alle im Reaktionssystem vorkommenden Spezies gelöst werden. Außerdem sind die Massenbrüche, die Temperatur, Dichte des Mischungsbruchs und der skalaren Dissipationsgeschwindigkeit abhängig. Diese Berechnungen sind so aufwendig, dass in der Praxis die Abhängigkeiten  $\rho^{(F)} = \rho^{(F)}(\chi, \xi)$ ,  $w_i^{(F)} = w_i^{(F)}(\chi, \xi)$  und  $T^{(F)} = T^{(F)}(\chi, \xi)$  aus den Berechnungen laminarer nicht-vorgemischter Flammen stammen. Daher werden Bibliotheken von Flammenstrukturen  $\rho^{(F)} = \rho^{(F)}(\xi)$ ,  $w_i^{(F)} = w_i^{(F)}(\xi)$  und  $T^{(F)} = T^{(F)}(\xi)$  bei verschiedenen skalaren Dissipationsgeschwindigkeiten benötigt.

Turbulente Strömungen weisen immer einen instationären Charakter auf, wobei die Schwankungen statistisch verteilt sind. Es befindet sich daher nicht an jedem Ort des Strömungsfelds ein bestimmtes Flamelet, so dass die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten aller möglichen Flamelets an einem Ort bestimmt werden muss. Zur Kopplung des Strömungsfeldes muss somit die PDF in Abhängigkeit des Mischungsbruchs und der Dissipationsrate bestimmt werden.

---

<sup>2</sup>Index F: unter Gültigkeit der Flamelet-Annahmen

Durch Favre-Mittelung erhält man die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit:

$$\overline{M_{iR_i}} = -\frac{1}{2}\bar{\rho} \int_0^1 \int_0^\infty \chi \frac{\partial}{\partial \xi^2} w_i^{(F)} \tilde{P}(\chi, \xi) d\chi d\xi \quad . \quad (4.53)$$

Die Variablen  $\chi$  und  $\xi$  werden üblicherweise als statistisch unabhängig angenommen, so dass man einen Produktansatz  $P(\chi, \xi) = P_1(\chi) P_2(\xi)$  verwenden kann.  $P_1(\chi)$  wird dabei durch eine  $\beta$ -PDF genähert. Fluktuationen in  $\chi$  werden ignoriert und  $P_2(\xi)$  wird durch eine Delta-Funktion genähert. Die skalare Dissipationsrate unter Berücksichtigung variabler Dichten wird wie folgt modelliert:

$$\chi(\xi) = \frac{a}{4\pi} \frac{3(\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1)^2}{2\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1} \exp(-2[\text{erfc}^{-1}(2\xi)]^2) \quad . \quad (4.54)$$

## 4.4 Strahlungsmodell

Das Discrete-Ordinates-Modell arbeitet, über einen großen Bereich optischer Dichten zuverlässig [139, 140]. Dabei löst das Discrete-Ordinates-Modell Strahlungsbilanzgleichungen für die diskrete Anzahl fester Raumwinkel, die durch den Richtungsvektor  $\vec{s}$  in globalen kartesischen Koordinaten gegeben sind. Der Raum jeder Zelle wird mit einer diskreten Anzahl fester Raumwinkel  $N_\theta \times N_\phi$  der Weite  $\omega_i$  diskretisiert (Abb. 4.7):

$$\nabla(I(\vec{s}, \vec{r})\vec{s}) + (\kappa + \sigma_s) I(\vec{s}, \vec{r}) = \kappa n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{s}', \vec{r}) \Phi(\vec{s}', \vec{r}) d\Omega' \quad . \quad (4.55)$$

Im Falle von Verbrennungsprozessen ist eine Kopplung der Strahlungsbilanzgleichungen mit der Energiebilanzgleichung nicht möglich. Der Energiegleichung wird aber ein Quellterm für Wärmestrahlung hinzugefügt. Es ist auch eine Betrachtung über verschiedene Wellenlängenbanden möglich, wobei für jede Bande ein spektraler Absorptionskoeffizient anzugeben ist:

$$\nabla(I_\lambda(\vec{s}, \vec{r})\vec{s}) + (\kappa_\lambda + \sigma_s) I_\lambda(\vec{s}, \vec{r}) = \kappa_\lambda n^2 I_{b,\lambda} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I_\lambda(\vec{s}', \vec{r}) \Phi(\vec{s}', \vec{r}) d\Omega' \quad . \quad (4.56)$$

Hieraus ergibt sich für die Strahlungsintensität:

$$I(\vec{s}, \vec{r}) = \sum_k I_{\lambda_k}(\vec{s}, \vec{r}) \nabla \lambda_k \quad . \quad (4.57)$$

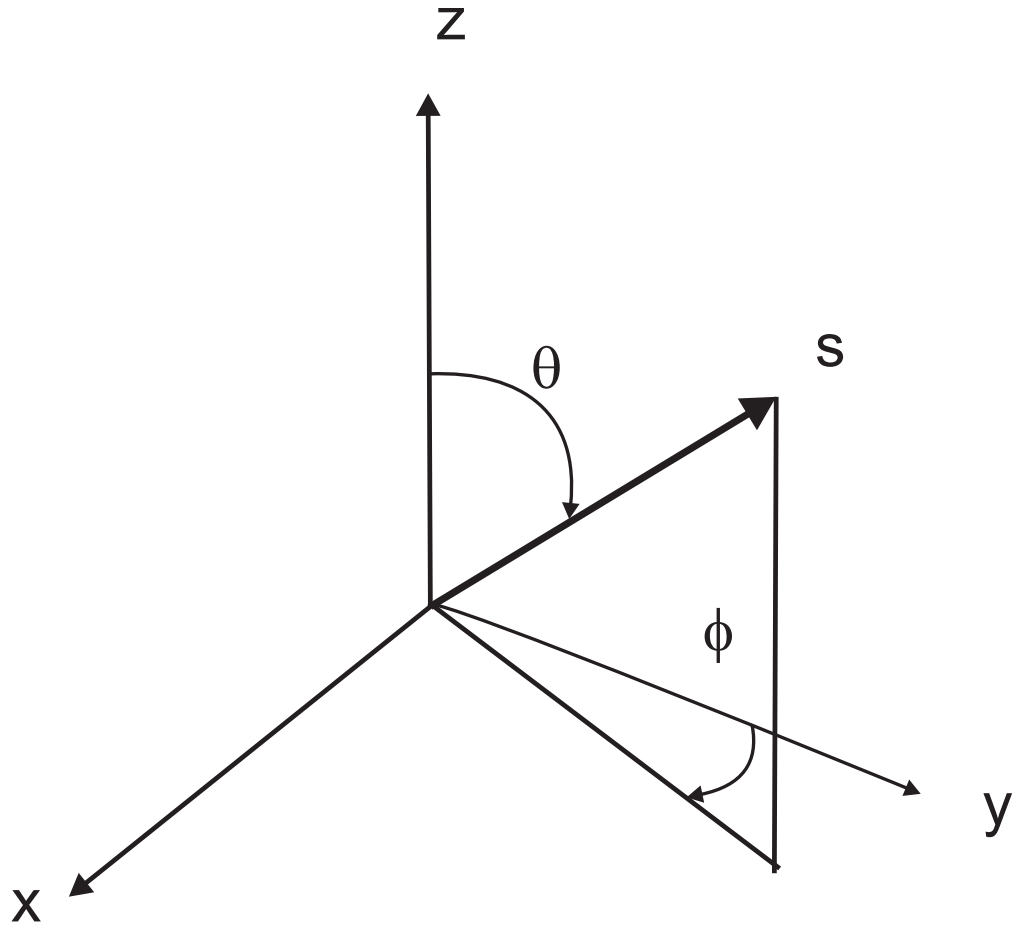


Abb. 4.7: Schematische Darstellung des Discret Ordinates Strahlungsmodells [114]

Speziell für Verbrennungsprozesse kann der Absorptionskoeffizient als gewichtete Summe der Absorptionskoeffizienten der einzelnen Gaskomponenten ermittelt werden. Es wird ein effektiver Absorptionskoeffizient berechnet, der die Summe der Absorptionskoeffizienten der reinen Gase und des reinen Rußes darstellt (weighted sum of gray gases model; WSGGM model):

$$\alpha_{s+g} = \alpha_g + \alpha_s \quad , \quad (4.58)$$

$$\epsilon_{g+s} = \sum_{i=1}^n k_i(T) [1 - \exp(-\alpha_i s)] \quad . \quad (4.59)$$

In Gl. 4.59 sind  $k_i$  temperaturabhängige Gewichtungsfaktoren und  $\alpha_i$  die Absorptionskoeffizienten der i-ten Graugaskomponente sowie  $s$  der Weglänge. Die

Summe der Koeffizienten  $k_i$  ist gleich eins. Der Absorptionskoeffizient des Rußes  $\alpha_{e_s}$  kann nach [141] abgeschätzt werden als:

$$\alpha_{e_s} = \frac{3.72 f_s C_0 T}{C_2} \quad , \quad (4.60)$$

mit den Konstanten

$$C_0 = \frac{36\pi n k_w}{(n^2 - k_w^2 + 2)^2 + 4n^2 k_w^2} \quad , \quad C_2 = 1.4388 \cdot 10^{-2} \text{ m K} \quad . \quad (4.61)$$

und den optischen Konstanten  $n = 2.53$  und  $k_w = 1.46$ , basierend auf den Messungen von Dalzell und Sarofim [142]. Die Rußvolumenanteil  $f_s$  wird dabei über ein Rußmodell, wie dem Magnussen-Modell [143], dem Tesner-Modell [144], dem Lindstedt-Modell [145] oder dem Moos-Brookes-Modell [146] bestimmt.

## 4.5 Durchführung der CFD-Simulation

Zur Durchführung einer Strömungssimulation wird mit Hilfe des CFD-Präprozessors ANSYS DesignModeler, eine Abbildung des Bilanzgebietes erstellt. Der DesignModeler ist ein CAD-Programm zur Erstellung einer Grundgeometrie, aus welcher anschließend ein Rechengitter erstellt wird. Im DesignModeler lassen sich Geometrien gemäß dem Bottom-Up-Prinzip erstellen, aber auch andere Acis- und CAD-Formate sind importierbar. Das Bottom-Up-Prinzip erfolgt über einen hierarchischen Aufbau. Dabei werden zunächst Sketches mit Grundgeometrien wie Linien, Kreisen oder Rechtecken erstellt, die anschließend mit Booleschen-Operationen zu Volumenkörpern bearbeitet werden können.

Das Rechengitter dient einer Verbrennungssimulation mit Hilfe einer LES als Turbulenz-Modell. Als Maß für die Ermittlung der maximalen Zeitschrittweite dient das Courant-Friederich-Levy (CFL) Kriterium:

$$\text{CFL} = \frac{v_{\max} \Delta t_{\max}}{\Delta x_{\min}} \quad (4.62)$$

Darin ist  $\Delta x_{\min}$  der kleinste im Modell vorkommende Abstand,  $\Delta t_{\max}$  der größte mögliche Zeitschritt und  $v_{\max}$  die größte vorkommende Geschwindigkeit. Ab einem CFL-Wert  $> 1$ , kann die Berechnung numerisch instabil werden. Wird der CFL-Wert zu klein, ist die Zeitschrittweite zu klein, so dass ein Voranschreiten in der Zeit unnötig aufwändig wird und die Zeitschrittweite vergrößert werden sollte. Da die Zeitintegration nicht im Mittel sondern lokal begrenzt ist, muss das CFL-Kriterium lokal (formal für jeden Diskretisierungspunkt) angewendet werden. Das CFL-Kriterium ist aber nur bei einer expliziten Zeitdiskretisierung zwingend einzuhalten, da sonst sofortige numerische Instabilität droht. Bei impliziten

Verfahren sind alle Parameter der neuen Zeitebene miteinander gekoppelt, wodurch es keine Begrenzung der räumlichen Ausbreitungsgeschwindigkeit von Informationen gibt, so dass das CFL-Kriterium nicht zwangsläufig erfüllt werden muss. Die hier durchgeführte Gittergenerierung hat das Ziel, die numerische Simulation einer Poolflamme über einen Zeitraum von 1 s innerhalb kurzer Zeit möglich zu machen. Hierzu wird ein Zeitschritt  $\Delta t = 0.0001$  s gewählt. Dabei soll das CFL-Kriterium  $< 1$  erfüllt werden. Da es sich um ein implizites Verfahren handelt, werden aber innerhalb der Flamme auch CFL-Kriterien  $\text{CFL} < 5$  akzeptiert, da eine möglichst effiziente Simulation im Vordergrund steht und mit keinen numerischen Instabilitäten zu rechnen ist [147]. Als praktisch geeignet hat sich eine Anzahl von 20 Iterationen pro Zeitschritt erwiesen.

In der CFD Simulation wird das Bilanzgebiet zur Simulation eines wechselwirkenden Poolfeuer durch ein 3-D block-strukturiertes, zylindrisches Gitter (Abb. 4.8) repräsentiert [31, 148–150]. Das wechselwirkende Feuer wird dabei über eine Anzahl  $N$  an Einlässen modelliert. Der Brennstoff wird als bereits verdampft angenommen und betritt das Bilanzgebiet mit Siedetemperatur  $T = T_{\text{bp}}$ . Die Massenströme an den Einlässen werden als konstant angenommen, wobei experimentelle Werte verwendet werden. Eine Simulation des Phasenübergangs flüssig/gasförmig findet nicht statt. Die Einlässe sind von einer Wand mit einer experimentell ermittelten Temperatur von  $T = 650$  K umgeben. Auf der Seite der Einlässe wird die Stirnfläche des Zylinders als Geschwindigkeitseinlass definiert, während die obere Stirnfläche sowie die Mantelfläche als Druckauslass definiert sind. Es werden Gitter mit einer Zellenanzahl  $< 5.5 \cdot 10^6$  verwendet. Die Strömungsverhältnisse innerhalb von Poolfeuern sind turbulent, instabil und haben eine dreidimensionale Struktur, welche viele Wirbel enthält. Da in einer sicherheitstechnischen Nutzung einer Simulation auch momentane Maximalwerte von Interesse sind, wird zur Wiedergabe der anisotropen Turbulenz eine Large-Eddy-Simulation mit Smagorinsky-Lilly Submodell, unter dynamischer Berechnung der Smagorinsky-Konstante, genutzt.

Als Verbrennungsmodell wird ein assumed-PDF Ansatz mit laminaren Flamelets genutzt. Der Oxidatorstrom hat dabei eine Temperatur von 300 K, der Brennstoffstrom eine Temperatur von 391 K. Zur Erstellung der Flamelets wird ein Reaktionsmechanismus mit 112 Spezies und 800 Elementarreaktionen genutzt [151]. Die für das assumed-PDF-Modell erforderliche Look-up-Tabelle wird mit Hilfe eines Präprocessors erstellt, wobei die folgenden Einstellungen genutzt werden (Tab 4.1): Der assumed-PDF-Ansatz wurde gewählt, da somit eine Beschreibung der nicht-Gleichgewichtschemie mit geringer Rechenzeit möglich ist. Als Strahlungsmodell wird das Discrete-Ordinates Modell (Kap. 4.4) genutzt, da innerhalb des Bilanzgebiets mit einer starken Schwankung der optischen Dichte und einer geringen optischen Dichte der Flammen mit kleinem Durchmesser zu

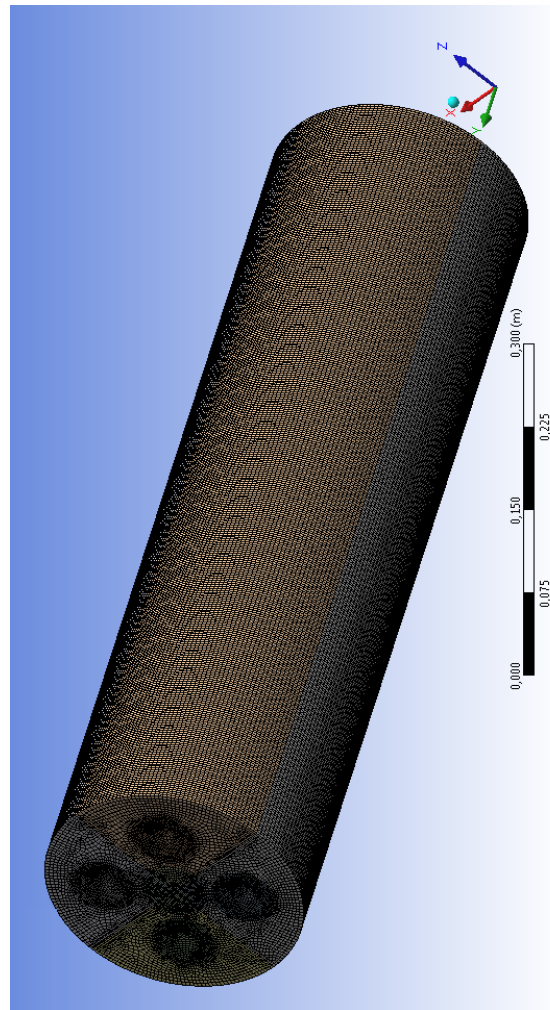


Abb. 4.8: Block strukturiertes Gitter zur Simulation eines wechselwirkenden n-Heptan Poolfeuers

Tab. 4.1: Anfangbedingungen der Verbrennungssimulationen I

Parameter	Wert
Gitterpunkte pro Flamelet	32
Maximale Anzahl an Flamelets	150
Skalare Dissipation	$0.01 \text{ s}^{-1}$
Schrittweite der skalaren Dissipation	$1 \text{ s}^{-1}$

Tab. 4.2: Anfangsbedingungen der Verbrennungssimulationen II

Größe	Wert
Massenanteil $N_2$	0.74
Massenanteil $O_2$	0.23
Massenanteil Ar	0.012
Massenanteil $CO_2$	0.001
Massenanteil $H_2O$	0.013
p	1013.25 hPa
$p - p_a$	0
Strömungsgeschwindigkeit $u_x = u_y = u_z$	0
Temperatur T	300 K
Mischungsbruch f	0

rechnen ist, die mit dem Discrete-Ordinates Modell am besten wiedergegeben werden kann. In [152] wird gezeigt, dass bei gleichmäßiger Verteilung innerhalb der Flamme mit 50 Winkeln und außerhalb der Flamme mit 350 Winkel gerechnet werden muss, um den Strahlungstransport akkurat wiederzugeben. Daher wird in dieser Studie mit 64 Winkeln gerechnet, so dass der Bereich innerhalb der Flamme und eine kurze Distanz außerhalb der Flamme richtig wiedergegeben ist. Da Streuung ein untergeordnetes Problem darstellt, findet keine Berücksichtigung statt, so dass in Gl. 4.55 ein Streukoeffizient  $\sigma_s = 0$  gesetzt wird. Aufgrund der komplizierten Verteilung der Intensitäten über die Wellenlängen wird auf eine spektrale Betrachtung verzichtet und eine Grau-Gas-Näherung eingeführt. In [153] kann experimentell gezeigt werden, dass die Brechzahl innerhalb einer n-Hexan-Flamme Werte im Bereich zwischen  $0.7 < n < 1.3$  annimmt. Die Brechzahl kann daher näherungsweise als konstant mit  $n = 1$  gesetzt werden. Da für die Berechnung des Rußvolumenanteils [143–146] mit Hilfe von Rußmodellen im Falle wechselwirkender Feuer noch keine Erkenntnisse vorliegen, der Rußvolumenanteil aber zur Berechnung des Emissionsgrads des Rußes benötigt wird, kann kein weighted-sum-of-grey-gases Modell angewandt werden. Stattdessen wird der effektive Absorptionskoeffizient erstmals über eine diskontinuierliche 4-Schritt-Funktion (Abb. 4.9) basierend auf den OSRAMO II und OSRAMO III (Kap. 2.14.2 und 2.14.3) verwendet.

Die Anfangs- und Randbedingungen der Verbrennungssimulationen können den Tab. 4.2 und 4.3 entnommen werden.



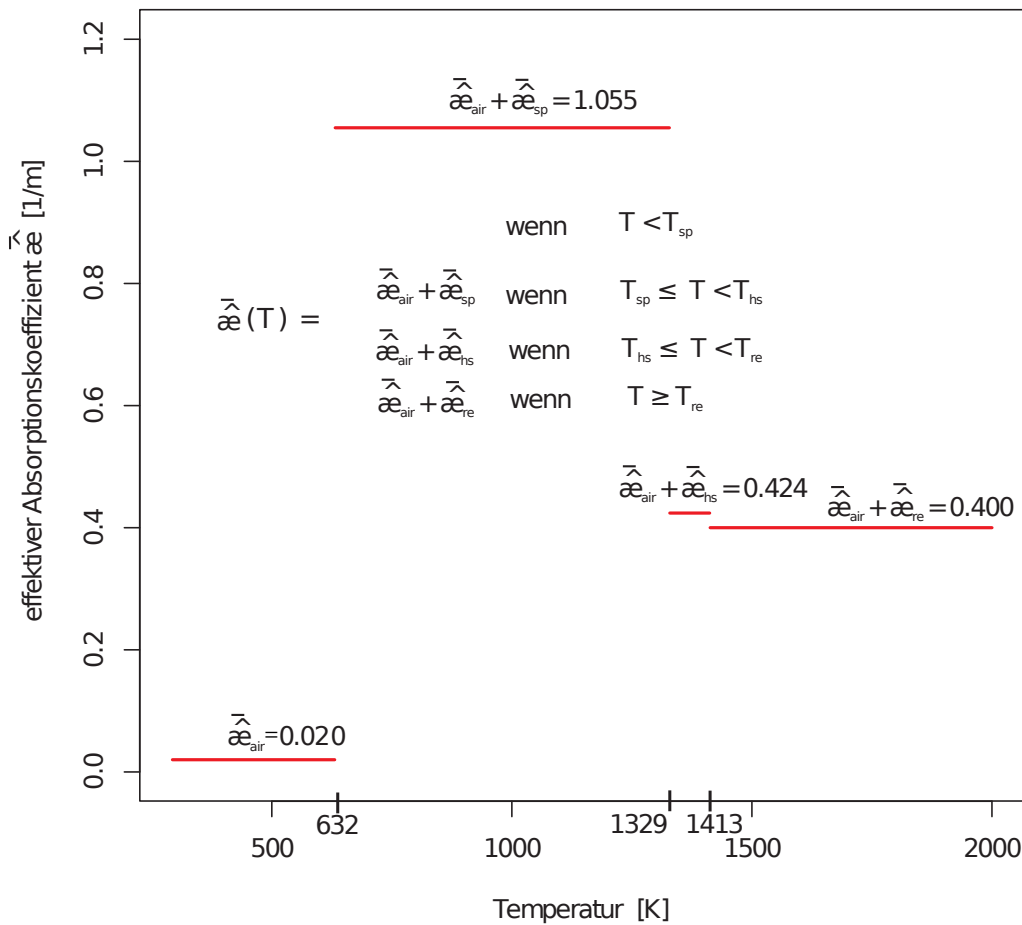


Abb. 4.9: Diskontinuierliche 4-Schrittfunktion zur Bestimmung des effektiven Absorptionskoeffizienten basierend auf den Strahlungsmodellen OSRAMO II/III [79, 80]

Zur Lösung der Bilanzgleichung wird der iterative arbeitende Solver FLUENT 14.5 verwendet [114]. Mit der segregierten SIMPLE-Methode (semi implicate methode for pressure linked equations) wird hier eine Druck-Geschwindigkeitskopplung genutzt, da diese sich als numerisch stabil erwiesen hat [154].

Zum Zeitpunkt  $t = 0$  beginnt in der Simulation der erste Rechenschritt. Von diesem Startwert an wächst zunächst die Größe der Flamme bis sie nach einiger Zeit ihre volle Größe ausgebildet hat. Für die Berechnung wechselwirkender Feuer wird bis zum Erreichen eines statistisch stationären Zustandes das realizable-k- $\epsilon$ -Modell gewählt. Anschließend wird die LES genutzt, um momentane Größen ermitteln zu können. Während der stationären Brenndauer der Flamme wird über ein Zeitintervall von  $\Delta t = 1.5$  s simuliert.

Tab. 4.3: Randbedingungen der Verbrennungssimulationen

Ort	Größe und Wert
obere Deckfläche + Mantelfläche	$p = p_a$ $T = 300 \text{ K}$
“pressure outlet“	open boundary conditions
Poolwand “wall“	$T = 650 \text{ K}$
Pooloberflächen “mass flow inlet“	experimentell ermittelte Massenabbrandraten $T = T_{bp}$
restliche untere Deckfläche	$u = 0.0001 \text{ m/s}$ $T = 300 \text{ K}$
“velocity inlet“	$f = 0$

# 5 Ergebnisse und Diskussion

## 5.1 Wärmeströme bei KW- und DTBP-Einzelpoolfeuern

### 5.1.1 Wärmerückstrom von KW-Poolfeuern

In einem KW-Poolfeuer gilt für den gesamten Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,tot}$  von der Flamme zur Brennstoffoberfläche:

$$\dot{Q}_{ba,tot} = \dot{Q}_{ba,\alpha} + \dot{Q}_{ba,\lambda} + \dot{Q}_{ba,rad} \quad . \quad (5.1)$$

Der Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,tot}$  setzt sich aus einem Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  infolge (konvektiven) Wärmeübergangs, einem Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  infolge Wärmeleitung und einem Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,rad}$  infolge thermischer Strahlung zusammen. Der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  lässt sich nach Hottel [48] berechnen:

$$\dot{Q}_{ba,\alpha} = \alpha_{g,f} A_P (T_g - T_v) \quad . \quad (5.2)$$

Hierin ist  $\alpha_{g,f}$  der Wärmeübergangskoeffizient zwischen der Gasphase  $T_g$  und der Flüssigkeit  $T_v$  beim Verdampfen. Der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  von der Flamme zur Brennstoffoberfläche durch die Querschnittsfläche der Poolwand lässt sich nach [50, 82, 155] berechnen. Aufgrund des geringen Temperaturunterschiedes zwischen der Tankwandtemperatur und der Raumtemperatur, wird ein Verlustwärmestrom in die Umgebung vernachlässigt, so dass für  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  gilt:

$$\dot{Q}_{ba,\lambda} = \bar{\lambda}_w A_w (-dT/dx_f) \approx \bar{\lambda}_w \pi d(T_F - T_{bp}) \quad . \quad (5.3)$$

Hier ist  $\bar{\lambda}_w$  der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient der Tank-/Poolwand,  $A_w$  die Querschnittsfläche der Poolwand und  $dT/dx_f$  der Temperaturgradient in der Poolwand wenig unterhalb der Brennstoffoberfläche. Der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,rad}$  kann nach [51, 155, 156] berechnet werden. Hierzu wird der Strahlungsaustausch zwischen dem Flammenboden und der Flüssigkeitsoberfläche berechnet, die jeweils als parallele kreisförmig Scheiben mit gleicher Oberfläche angenommen werden. Der Abstand des Flammenbodens von der Flüssigkeitsoberfläche wird von Hertzberg [51] mit  $h_{Fb} = 0.25 H$  angesetzt, so dass für  $\dot{Q}_{ba,rad}$  gilt:

$$\dot{Q}_{ba,rad} = \varphi_{F,f} (1 - e^{-k\beta d}) A_{Fb} \sigma (T_F^4 - T_{bp}^4) \quad . \quad (5.4)$$

Hier ist  $\varphi_{F,f}$  die Einstrahlzahl zwischen Flammenbodenfläche  $A_{Fb} \approx A_P$  und der Flüssigkeit,  $k$  der Extinktionskoeffizient der Flamme,  $\beta$  ein brennstoffabhängiger

Korrekturfaktor für die mittlere Weglänge,  $\sigma$  die Stefan-Boltzmann-Konstante und  $T_F$  die Flammentemperatur. Für die Energiebilanz (Energierückkopplungsmechanismus) an der Phasengrenzfläche zwischen Brennstoffballen und Flüssigkeitsoberfläche, infolge des Wärmerückstroms  $\dot{Q}_{ba,tot}$  von der Flamme zur Flüssigkeit gelten die Gln. 2.9 - 2.10.

In Gl. 2.10 ist  $\dot{Q}_{f,ges}$  der gesamte Wärmestrom erforderlich zur Verdampfung  $\dot{Q}_v$ , Erwärmung  $\dot{Q}_{\Delta T}$  des Brennstoffs inklusive Wärmeleitung  $\dot{Q}_{\lambda,f}$  innerhalb der Flüssigkeit,  $\dot{Q}_{in}$  ein Wärmestrom von einem Substrat in die brennbare Flüssigkeit und  $\dot{Q}_{verl,w}$  ein Verlust-Wärmestrom der Poolwand an die Umgebung. Es wird im folgenden jedoch angenommen, dass  $\dot{Q}_{ba,tot}$  von den Brennstoff- und Pyrolysegasballen nicht absorbiert wird und demnach  $\bar{\tau}_{fp} = 1$  gilt. Zudem können die hier behandelten Poolfeuer als adiabatische Poolflammen betrachtet werden, so dass  $\dot{Q}_{verl,w} \approx 0$  und  $\dot{Q}_{in} \approx 0$  angenommen werden und die Massenabbrandrate  $\dot{m}_f''$  allein vom Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,tot}$  zwischen Flamme und Flüssigkeitsoberfläche abhängig ist.

### 5.1.2 Einfluss der thermischen Stabilität auf den Wärmerückstrom

Messungen der Flüssigkeitstemperaturen, während des Abbrandes von DTBP und TBPB, sind in Abb. 5.1 und Abb. 5.2 dargestellt. Die Pfeile zeigen den Zeitpunkt, zudem der Flüssigkeitsspiegel die gleiche Höhe  $x_f$  wie das Thermoelement hat. Folglich befindet sich links des Pfeils die Temperatur der flüssigen Phase  $T_f$ , während rechts des Pfeils die Temperatur der Gasphase  $T_g$  zu erkennen ist. Während des Phasenübergangs wird beim DTBP eine mittlere Verdampfungstemperatur von  $T_v = 381$  K gemessen, was nahe dem Siedepunkt von  $T_{bp} = 383$  K [157] liegt. Im Falle des TBPB ist unter atmosphärischen Bedingungen aufgrund der beginnenden Zersetzungsktion kein Siedepunkt bestimmbar. Die gemessene mittlere Verdampfungstemperatur liegt bei  $T_v = 404$  K. Die Verdampfungstemperaturen sind über den betrachteten Durchmesserbereich konstant. Zudem ist in Abb. 5.1 zu erkennen, dass in einem Zeitintervall von  $\Delta t = 7$  s eine Flüssigkeitstemperatur oberhalb der Onset-Temperatur  $T_{onset} = 363$  K [158] erreicht wird, ab der eine Zersetzung in der flüssigen Phase beginnt. Ein ähnliches Verhalten ist auch beim TBPB zu beobachten (s. Abb. 5.2), wo sich ein Zeitintervall  $\Delta t = 9$  s oberhalb der Onset-Temperatur von  $T_{onset} = 365$  K [159] ergibt.

Es kann im Folgenden gezeigt werden, dass im Fall von Peroxid-Poolfeuern die Energiebilanz (Gl. 5.21) an der Phasengrenzfläche um einen zusätzlichen Wärmestrom  $\dot{Q}_d$ , infolge einer Zersetzungsreaktion in der brennbaren Flüssigkeit,

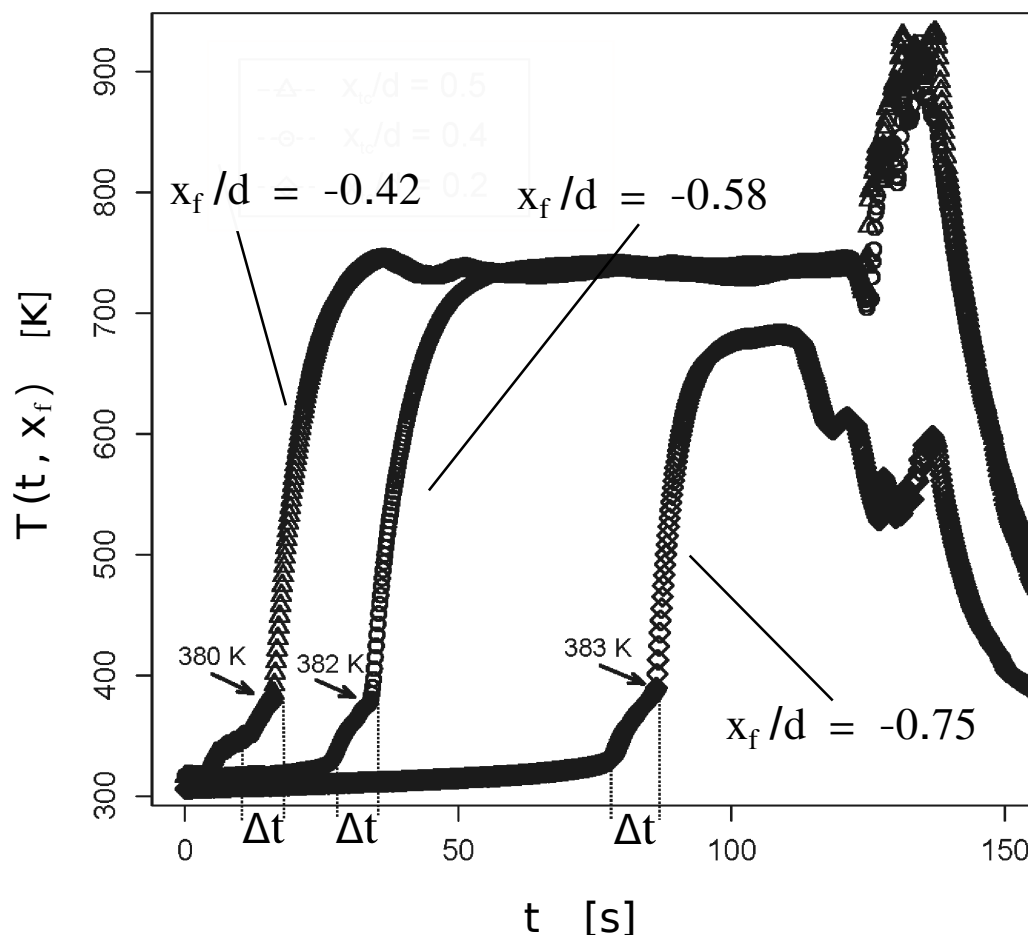


Abb. 5.1: Temperaturverläufe in der Flüssigphase  $T_f(t, x_f)$  und der Gasphase  $T_g(t, x_f)$  eines DTBP Poolfeuers ( $d = 6$  cm) entlang der Poolachse

erweitert werden muss. Der zusätzliche Wärmestrom  $\dot{Q}_d$ , kann unter der Annahme einer Flüssigphasenreaktion, als eine Reaktion in einem idealen, isothermen, kontinuierlichen Rührkesselreaktor (CSTR, Abb. 5.3) modelliert werden. Diese Modell-Annahme ist plausibel, da die Zersetzungsreaktion nur in einer dünnen Flüssigkeitsschicht stattfindet. Während des Verbrennungsprozesses sinkt diese Schicht nach unten, wobei die Zersetzungsprodukte aus der flüssigen Phase verdampfen und neues flüssiges DTBP in die Reaktionszone eindringt, wobei der zu erwartende Umsatz des DTBP infolge der Zersetzungsreaktion sehr gering ist. Der CSTR wird also nicht auf das Gesamtvolumen der flüssigen Phase bezogen,

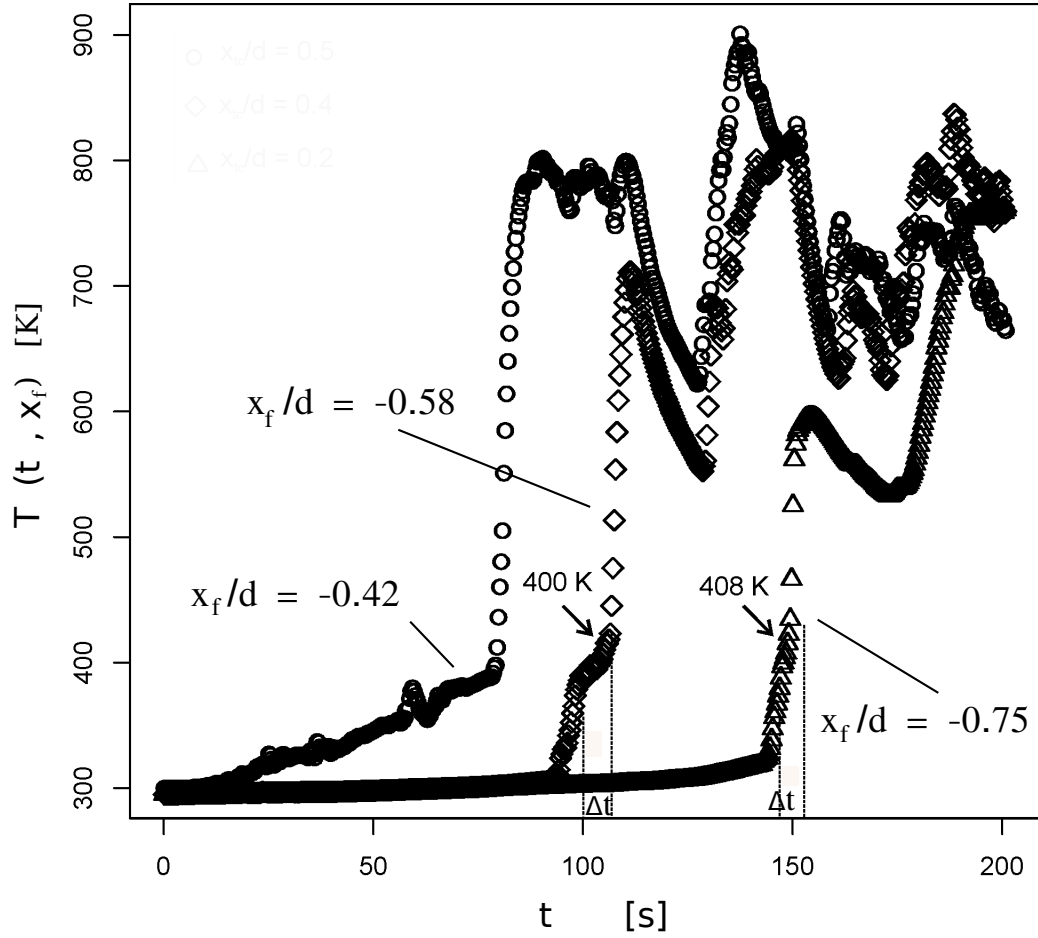


Abb. 5.2: Temperaturverläufe in der Flüssigphase  $T_f(t, x_f)$  und der Gasphase  $T_g(t, x_f)$  eines TBPB Poolfeuers ( $d = 6$  cm) entlang der Poolachse

sondern ist auf eine, wie in Abb. 5.3 gezeigte, dünne Reaktionszone begrenzt. In einem CSTR berechnet sich die Reaktionsgeschwindigkeit  $r$  für eine Reaktion 1. Ordnung ( $n = 1$ ,  $A \xrightarrow{k} P$ ) nach Gl. 5.5:

$$r = k c_{A,\text{in}} (1 - U) . \quad (5.5)$$

Dabei ist  $k$  die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante,  $c_{A,\text{in}}$  die Stoffmengenkonzentration am Eintritt des CSTRs,  $U = U_A$  der Umsatz an DTBP und  $\bar{t}$  die mittlere Verweilzeit. Die Damköhlerzahl  $Da = Da_1$  ergibt sich wie folgt:

$$Da = \frac{(-\nu_A) \bar{t} r_0}{c_{A,\text{in}}}, \text{ mit } c_{A,\text{in}} = \frac{\dot{m}_f'' A_P}{\dot{V} M_A} . \quad (5.6)$$

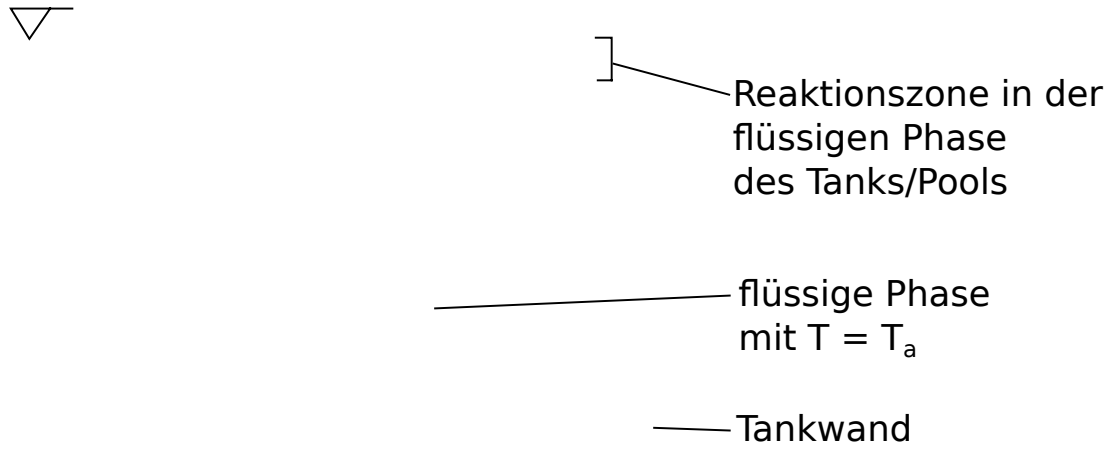


Abb. 5.3: Flüssigphaseneaktion bei Peroxid-Poolfeuern in einer Reaktionszone (dünne Schicht) in Pool bzw. Tank, die als CSTR modelliert wird

Die mittlere Verweilzeit  $\bar{t}$  kann unter Annahme einer Ausdehnungszahl  $\epsilon = 0$  mit der Raumzeit  $\tau$  des CSTRs gleichgesetzt werden, wobei das gemessene Zeitintervall  $\Delta t$  als die Raumzeit  $\tau$  interpretiert wird:

$$\bar{t} = \tau \equiv \Delta t \quad . \quad (5.7)$$

Mit einem stöchiometrischen Koeffizienten von  $\nu_A = -1$  ergibt sich der Umsatz zu:

$$U = \frac{Da}{1 + Da} = \frac{k \Delta t}{1 + k \Delta t} = \frac{k \tau}{1 + k \tau} \quad . \quad (5.8)$$

Der zusätzliche Wärmestrom  $\dot{Q}_d$  infolge einer Zersetzungsreaktion in der Flüssigkeit berechnet sich daher als:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_d &= V k c_{A,in} (1 - U) (-\Delta h_d) \quad , \\ &= \tau k (\dot{m}_{A,in}/M_A) (1 - U) (-\Delta h_d) \quad , \\ &= \dot{m}_{A,in} U (-\Delta h_d) \quad , \\ &= U (\dot{m}_f'' A_P \dot{m}_f'' (-\Delta h_d)) \quad . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Mit einer Energiebilanz (Gl. 5.27) kann gezeigt werden, dass die Berechnung des gesamten Wärmerückstroms  $\dot{Q}_{ba,tot}$  organischer Peroxide aufgrund des zusätzlichen Wärmestromes  $\dot{Q}_d$  modifiziert werden muss. Dies führt dazu, dass die Gl. 5.1 additiv zu erweitern ist:

$$\dot{Q}_{ba,tot} = \dot{Q}_{ba,\alpha} + \dot{Q}_{ba,\lambda} + \dot{Q}_{ba,rad} + \dot{Q}_d \quad . \quad (5.10)$$

Tab. 5.1: Wärmeströme von Peroxid-Poolfeuern ( $d = 3 \text{ m}$ ) [31, 32] im Strahlungslimit im Vergleich zu KW Poolfeuern ( $\dot{Q}_{\text{ba,rad,KW}} = 190 \text{ kW}$  [15])

	DTBP	TBPB
$\dot{Q}_d \text{ [kW]}$	150	364
$\dot{Q}_{\text{ba,rad,OP}} \text{ [kW]}$	384	340
$\dot{Q}_d / \dot{Q}_{\text{ba,rad,OP}} [-]$	0.40	0.93
$\dot{Q}_{\text{ba,rad,OP}} / \dot{Q}_{\text{ba,rad,KW}} [-]$	2.0	1.8
$\dot{Q}_d / A_P \text{ [kW/m}^2\text{]}$	21	51

Mit einer Reaktionsgeschwindigkeitskonstante für DTBP von  $k = 5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  (für  $T_v = 381 \text{ K}$ ) [158], sowie für TBPB von  $k = 9.5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  (für  $T_v = 403 \text{ K}$ ) [159], Massenabbrandraten für DTBP ( $\dot{m}_f'' = 0.3 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ ) nach [31] sowie TBPB ( $\dot{m}_f'' = 0.37 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ ) nach [32] und mit den Zersetzungsenthalpien nach Malow und Wehrstedt [160] von  $-\Delta h_d = 1365 \text{ kJ/kg}$  für DTBP und  $-\Delta h_d = 1377 \text{ kJ/kg}$  für TBPB lässt sich der Wärmestrom  $\dot{Q}_d$  mit Gl. 5.9 berechnen (s. Tab. 5.1). Der Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{\text{ba,rad}}$  (nach Gl. 5.4) kann unter Verwendung einer Einstrahlzahl  $\varphi_{F,f} = 0.07$  zwischen Flammenboden und Brennstoffoberfläche, einem  $k\beta = 2.24 \text{ m}^{-1}$  des Zersetzungsprodukts Aceton für DTBP sowie einem  $k\beta = 2.7 \text{ m}^{-1}$  des Zersetzungsprodukts Benzol für TBPB, einer Flammenbodenfläche  $A_{FB} = 28.27 \text{ m}^2$  und einer Flammenbodentemperatur von  $T_F = 1370 \text{ K}$  für DTBP [31] und  $T_F = 1360 \text{ K}$  für TBPB [32] berechnet werden (s. Tab. 5.1).

Die Größe  $\dot{Q}_d$  ist dabei wenig sensitiv gegenüber  $\dot{m}_f''$ . Eine Steigerung von  $\dot{m}_f''$  um 10 % führt lediglich zu einer Zunahme von  $\dot{Q}_d$  um 2 %.

Es ist zu erkennen, dass im Falle des DTBP  $\dot{Q}_d \approx 0.4 \dot{Q}_{\text{ba,rad,OP}}$  und im Falle des TBPB  $\dot{Q}_d \approx \dot{Q}_{\text{ba,rad,OP}}$  gilt. Poolfeuer organischer Peroxide im Strahlungslimit werden also durch zwei unterschiedliche Mechanismen ( $\dot{Q}_{\text{ba,rad}}$  und  $\dot{Q}_d$ ) kontrolliert. Zudem zeigt sich in Tab. 5.1, dass der Strahlungswärmestrom  $\dot{Q}_{\text{ba,rad,OP}}$  in Poolfeuern organischer Peroxide um den Faktor 2 größer ist, als der Strahlungswärmestrom  $\dot{Q}_{\text{ba,rad,KW}}$  in Kohlenwasserstoff-Poolfeuern. Infolge dieser erhöhten Wärmeströme kann also die deutlich erhöhte Massenabbrandrate organischer Peroxide, im Vergleich zu Kohlenwasserstoffen, erklärt werden.



### 5.1.3 Flammentemperaturprofile

Die Abb. 5.4 zeigt vertikale Profile, der korrigierten Flammentemperaturen  $T_F$  eines DTBP-Poolfeuers  $d = 6$  cm. Bei  $r = 3$  cm,  $x = 3$  cm wird die maximale Flammentemperatur  $T_{F,\max} = 2075$  K erreicht. Die hohen Temperaturen im äußeren Bereich ( $r = 3$  cm) der Flamme können durch einen zweistufigen Abbau des DTBP erklärt werden. Im ersten Schritt kommt es zur Zerfallsreaktion der sehr energiereichen Peroxid-Bindung, die zu einer ersten Temperaturerhöhung führt. Bedingt durch den im Vergleich mit KW-Brennstoffen hohen Anfangsimpuls, kommt es im inneren Bereich der Flamme ( $r < 1$  cm,  $x < 10$  cm) zu einem Sauerstoffmangel. Der zweite Schritt des Peroxidabbaus infolge von

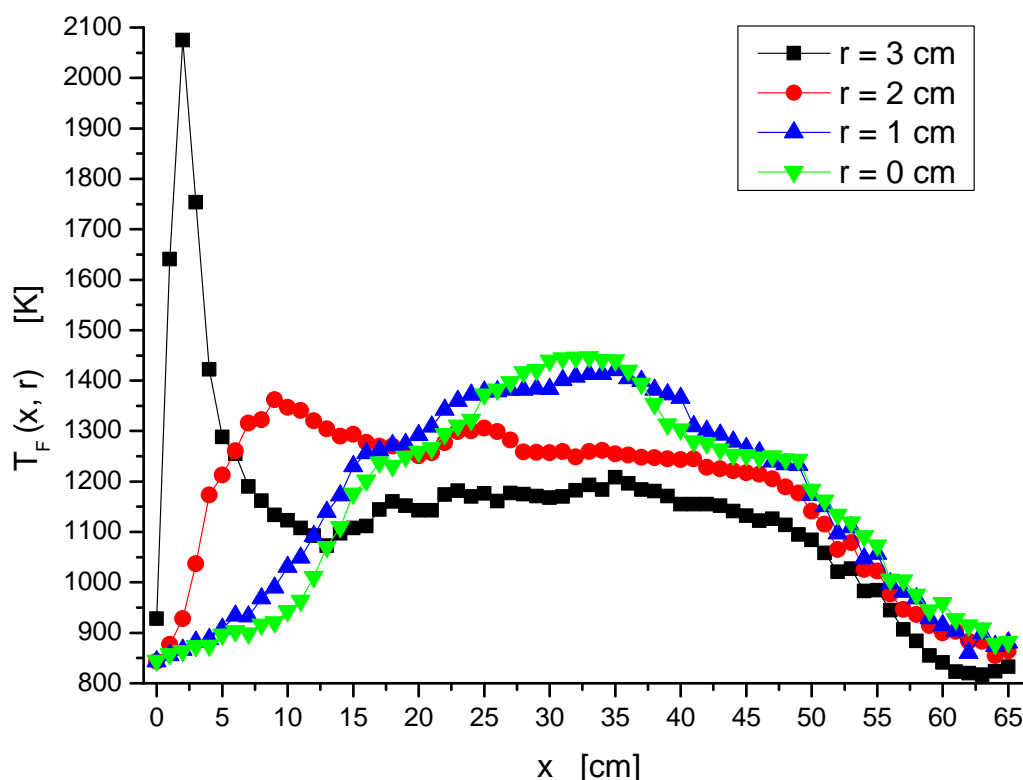


Abb. 5.4: Gemessene vertikale Profile der Flammentemperaturen  $T_F(x, r)$  eines DTBP-Poolfeuers  $d = 6$  cm

Zerfallsreaktionen der C-Ketten ist im inneren Bereich der Flamme nur durch  $\text{CH}_3$ -Radikale möglich, wodurch sich die im Vergleich zu KW-Flammen gleichen

Durchmessers [75] niedrigen Temperaturen von  $T < 1000$  K erklären. Es bildet sich eine aufsteigende Gassäule aus Zersetzungsprodukten aus, die erst in einem höheren Bereich der Flamme ( $r < 1$  cm,  $15 < x < 35$  cm) abgebaut werden können. Daher wird im Bereich  $r < 1$  cm das Temperaturmaximum  $T_{f,\max} = 1450$  K erst in einer Höhe  $x = 35$  cm erreicht.

Im äußeren Bereich der Flamme  $r = 3$  cm,  $x = 3$  kommt es, neben der freiwerdenden Energie der Zersetzungsreaktion, simultan auch zum Abbau der C-Ketten durch OH-Radikale, wodurch sich die vergleichsweise sehr hohen Temperaturen erklären. Der OH-Radikal bedingte Abbau bei  $r = 2$  cm findet erst in einer Höhe von  $x > 5$  cm statt, da erst Luftsauerstoff in die Flamme diffundieren muss. Da im Bereich  $r = 2$  cm die Energien infolge der Zersetzungsreaktion und des C-Kettenabbaus nicht mehr simultan freigesetzt werden, ist das Temperaturmaximum von  $T_{f,\max} = 1400$  K deutlich niedriger als im äußeren Bereich  $r = 3$  cm. Zudem ist ein Fehlen der für KW-Brennstoffe typischen heißen klaren Verbrennungszone in Höhe  $H_{cl}$  (s. Abb. 2.4) zu erkennen, in welcher der Hauptanteil des Brennstoffes umgesetzt wird und sehr hohe Temperaturen erzielt werden. Eine ähnliches Temperaturprofil mit einem Temperaturmaximum auf der Flammenachse, kann auch bei großen Durchmessern ( $d = 3$  m, [31]) beobachtet werden. Charakteristisch ist das Auftreten von bimodalen, radialen M-Profilen der Flammentemperaturen. Mit zunehmender Höhe  $x$  ist eine Verschiebung der mittleren Temperaturen zur Flammenachse, zu erkennen. In der Pulsationszone der Höhe  $H_{pul}$  für  $x > 40$  cm stellt sich ein langer Intermittenzbereich ein, in dem die Flammentemperaturen in allen radialen Positionen stetig abnehmen (s. Abb. 5.4).

#### 5.1.4 Berechnung des Wärmerückstroms bei KW-Poolfeuern

Für adiabatische Poolflammen berechnet sich der gesamte Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,tot}$  von der Flamme zur Brennstoffoberfläche nach Gl. 5.1. Zur Berechnung des konvektiven Wärmerückstroms  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  wird als maßgebliche Temperatur  $T_g = 410$  K [161] der Gasphase über der Flüssigkeit angenommen. Der konvektive Wärmeübergangskoeffizient zwischen der Gasphase und der Flüssigkeit wird für KW-Poolfeuer nach [48, 162, 163] mit  $\alpha_{g,f} \approx 6$  W/(m<sup>2</sup> K) abgeschätzt. Somit kann  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  für ein n-Heptan Poolfeuer ( $d = 6$  cm,  $\dot{m}_f'' = 0.0105$  kg/(m<sup>2</sup> s)) nach Gl. 5.2 berechnet werden:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ba,\alpha} &= \alpha_{g,f} A_P (T_g - T_v) \\ &\approx 6 \text{ W/(m}^2 \text{ K)} \cdot 2.83 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot (410 \text{ K} - 381 \text{ K}) \\ &\approx 0.5 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.11}$$

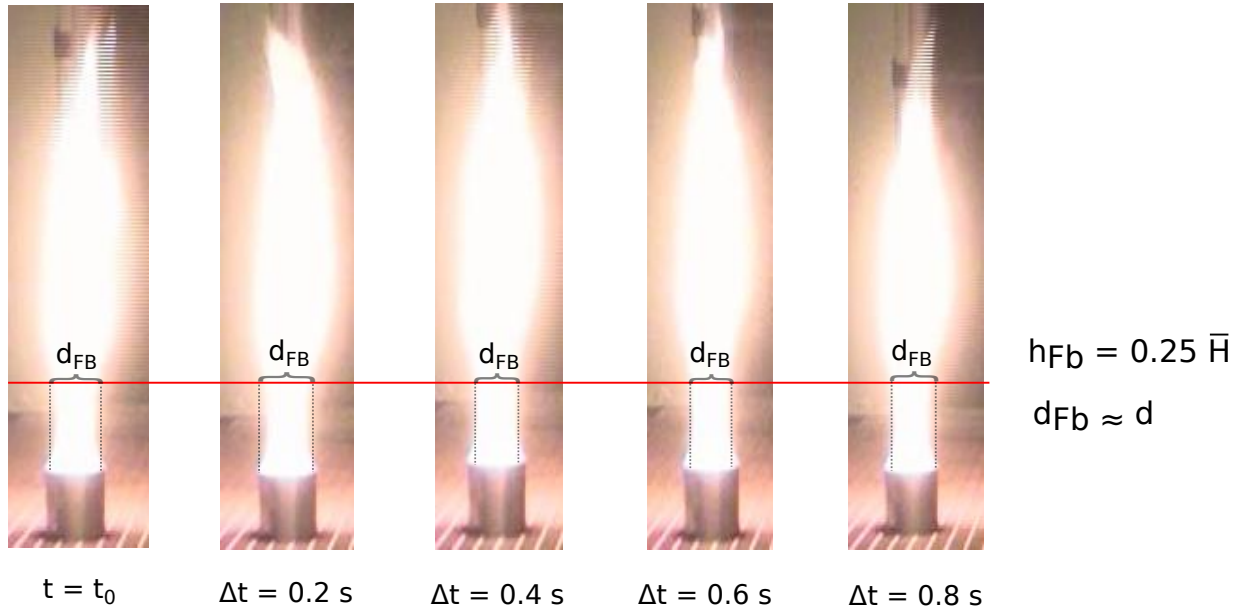


Abb. 5.5: Vergleich der momentanen Flammenbodendurchmesser  $d_{FB}$  mit dem Pooldurchmesser für ein n-Heptan-Poolfeuer ( $d = 6 \text{ cm}$ )

Der Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  berechnet sich nach Gl. 5.3. Aus [161] lässt sich ein Temperaturgradient von  $dT/dx_f \approx 800 \text{ K/m}$  abschätzen. Zusammen mit einem Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten  $\lambda_w \approx 21 \text{ W/(m K)}$  (für Wandmaterial X6CrNi18-11), einer Querschnittsfläche der Poolwand  $A_w$  und einem Temperaturgradienten wenig unterhalb der Brennstoffoberfläche  $dT/dx_f$  ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \dot{Q}_{ba,\lambda} &= \lambda_w A_w (-dT/dx_f) \\
 &\approx 21 \text{ W/(m K)} \cdot \pi(0.032^2 - 0.03^2) \text{ m}^2 \cdot 800 \text{ K/m} \\
 &\approx 6.5 \text{ W} .
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

Der Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,\text{rad}}$  berechnet sich nach Gl. 5.4. Die Einstrahlzahl  $\varphi_{Fb,f}$  zwischen Flamme und Brennstoffoberfläche wird mit  $d_{\text{eff}} = d_{FB} = d$  zu  $\varphi_{Fb,f} = 0.21$  berechnet. Als Extinktionskoeffizient wird  $k\beta = 1.39 \text{ m}^{-1}$  [15] für n-Heptan verwendet. Als Flammentemperatur wird  $T_F = 1200 \text{ K}$  [75] benutzt. Die Flammenbodenoberfläche kann wie in Abb. 5.5 zu erkennen durch

die Pooloberfläche ( $A_{\text{Fb}} \approx A_{\text{P}}$ ) näherungsweise beschrieben werden. Hieraus berechnet sich ein  $\dot{Q}_{\text{ba,rad}}$  nach Gl. 5.4 von:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{\text{ba,rad}} &= \varphi_{\text{Fb,f}}(1 - e^{-k\beta_{\text{d,eff}}}) A_{\text{Fb}} \sigma(T_{\text{F}}^4 - T_{\text{bp}}^4) \\ &\approx 0.21 \cdot 0.08 \cdot 2.83 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot 5.6 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4) \\ &\quad (1200^4 \text{ K}^4 - 381^4 \text{ K}^4) \\ &\approx 5.5 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.13}$$

Aus Gln. 5.11 - 5.13 folgt nach Gl. 5.1 ein gesamter Wärmerückstrom für ein n-Heptan Einzelpoolfeuer ( $d = 6 \text{ cm}$ ) von:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{\text{ba,tot}} &= \dot{Q}_{\text{ba,\alpha}} + \dot{Q}_{\text{ba,\lambda}} + \dot{Q}_{\text{ba,rad}} \\ \dot{Q}_{\text{ba,tot}} &\approx 0.5 \text{ W} + 6.5 \text{ W} + 5.5 \text{ W} \approx 12.5 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.14}$$

### 5.1.5 Berechnung des Wärmerückstroms bei DTBP-Poolfeuern

Für ein DTBP-Poolfeuer ( $d = 6 \text{ cm}$ ) lässt sich der Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{\text{d}}$  infolge Zersetzung in der Flüssigkeit nach Gl. 5.9 berechnen:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{\text{d}} &= U A_{\text{P}} \dot{m}_{\text{f}}'' (-\Delta h_{\text{d}}) \\ &\approx 0.062 \cdot 2.83 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot 0.18 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s}) \cdot 1.365 \cdot 10^6 \text{ J/kg} \\ &\approx 43 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.15}$$

Der konvektive Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{\text{ba,\alpha}}$  lässt sich nach Gl. 5.2 berechnen. Als maßgebliche Temperatur der Gasphase über der Flüssigkeitsoberfläche wird ein Wert von  $T_{\text{g}} = 750 \text{ K}$  aus der Abb. 5.1 entnommen. Für den Wärmeübergangskoeffizient zwischen der Gasphase und der Flüssigkeit wird derselbe Wert wie für ein KW-Poolfeuer nach [48, 162, 163] mit  $\alpha_{\text{g,f}} \approx 6 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$  verwendet:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{\text{ba,\alpha}} &= \alpha_{\text{g,f}} A_{\text{P}} (T_{\text{g}} - T_{\text{v}}) \\ &\approx 6 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}) \cdot 2.83 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot (750 \text{ K} - 381 \text{ K}) \\ &\approx 6 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.16}$$

Der Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{\text{ba,\lambda}}$  lässt sich nach Gl. 5.3 berechnen. Aus Abb. 5.6 lässt sich ein Temperaturgradient wenig unterhalb der Brennstoffoberfläche von  $dT/dx_{\text{f}} \approx -1500 \text{ K/m}$  abschätzen. Aufgrund des geringen Temperaturunterschiedes zwischen der Tankwandtemperatur und der Raumtemperatur wird ein Verlustwärmestrom  $\dot{Q}_{\text{verl,w}}$  vernachlässigt. Zusammen mit einem Wärmeleitfähigkeits-

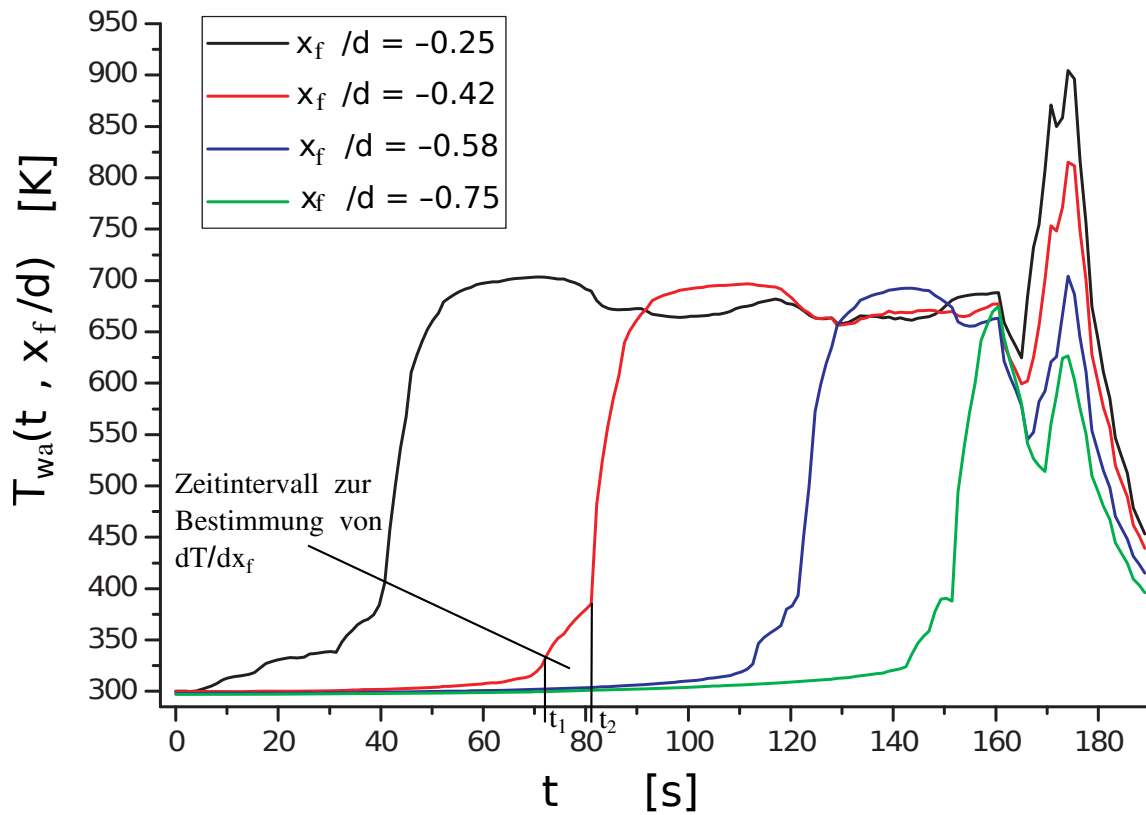


Abb. 5.6: Temperaturverläufe  $T_{wa}(t, x_f/d)$  in der Poolwand während des Abbrandes eines DTBP-Poolfeuers ( $d = 6$  cm) zur Ermittlung von  $-dT/dx_f$

koeffizienten  $\bar{\lambda}_w \approx 21$  W/(m K) (für Wandmaterial X6CrNi18-11), einer Querschnittsfläche  $A_w$  der Poolwand und einem Temperaturgradienten  $dT/dx_f$  wenig unterhalb der Brennstoffoberfläche ergibt sich:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{ba,\lambda} &= \bar{\lambda}_w A_w (-dT/dx_f) \\ &\approx 21 \text{ W/(m K)} \pi (0.032^2 \text{ m} - 0.03^2 \text{ m}) \cdot 1550 \text{ K/m} \\ &\approx 12 \text{ W} . \end{aligned} \quad (5.17)$$

Der Wärmerückstrom  $\dot{Q}_{ba,rad}$  kann nach Gl. 5.4 berechnet werden. Der Flammenboden nach Abb. 5.7 hat einen Durchmesser von  $d_{FB} = 2.4 d$ . Der Abstand des Flammenbodens vom Flüssigkeitsspiegel wird von Hertzberg [51] mit  $h_{FB} = 0.25 H$  angesetzt. Hier zeigt sich ein besonderes Verhalten von DTBP-Poolfeuern, bei denen es in der Höhe  $h_{FB}$  zu einer Verbreiterung des Flammenbodens (s. Abb. 5.7) auf mehr als den doppelten Pooldurchmesser kommt. Die Einstrahlzahl für diese

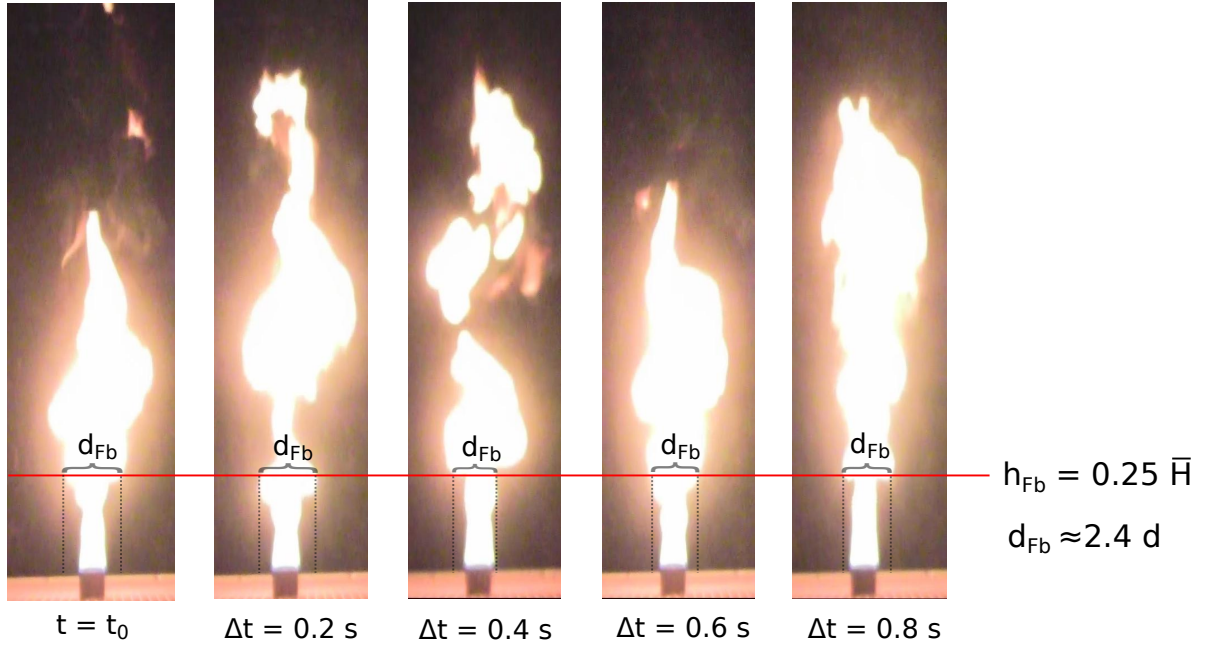


Abb. 5.7: Vergleich der momentanen Flammenbodendurchmesser  $d_{Fb}$  mit dem Pooldurchmesser  $d$  für ein DTBP-Poolfeuer  $d = 6$  cm

Geometrie (s. Abb. 5.8) kann wie folgt berechnet werden [164]:

$$\varphi_{Fb,f} = \frac{1}{2R_1^2} \left( 1 + R_1^2 + R_2^2 - \sqrt{(1 + R_1^2 + R_2^2)^2 - 4R_1^2 R_2^2} \right) . \quad (5.18)$$

Mit Gl. 5.18 wird eine Einstrahlzahl von  $\varphi_{Fb,f} = 0.07$  berechnet und es ergibt sich eine Fläche des Flammenbodens von  $A_{Fb} = 0.0162 \text{ m}^2$ . Als Extinktionskoeffizient wird  $k\beta = 2.24 \text{ m}^{-1}$  [15] (Hauptzersetzungsprodukt Aceton) verwendet und ein effektiver Durchmesser von  $d_{\text{eff}} = 2.4 d$  angenommen. Als Flammentemperatur wird ein  $T_F = 1450 \text{ K}$  aus Abb. 5.4 verwendet:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{ba,\text{rad}} &= \varphi_{Fb,f} (1 - e^{-k\beta d_{\text{eff}}}) A_{Fb} \sigma (T_F^4 - T_V^4) \\ &\approx 0.07 \cdot 0.24 \cdot 0.0162 \text{ m}^2 \cdot 5.6 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4) (1450^4 \text{ K}^4 - 381^4 \text{ K}^4) \\ &\approx 68 \text{ W} . \end{aligned} \quad (5.19)$$

Aus Gln. 5.15 - 5.19 folgt ein gesamter Wärmerückstrom für ein DTBP Einzelpoolfeuer ( $d = 6$  cm) von:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{ba,\text{tot}} &= \dot{Q}_d + \dot{Q}_{ba,\alpha} + \dot{Q}_{ba,\lambda} + \dot{Q}_{ba,\text{rad}} \\ \dot{Q}_{ba,\text{tot}} &\approx 43 \text{ W} + 6 \text{ W} + 12 \text{ W} + 68 \text{ W} \approx 129 \text{ W} . \end{aligned} \quad (5.20)$$

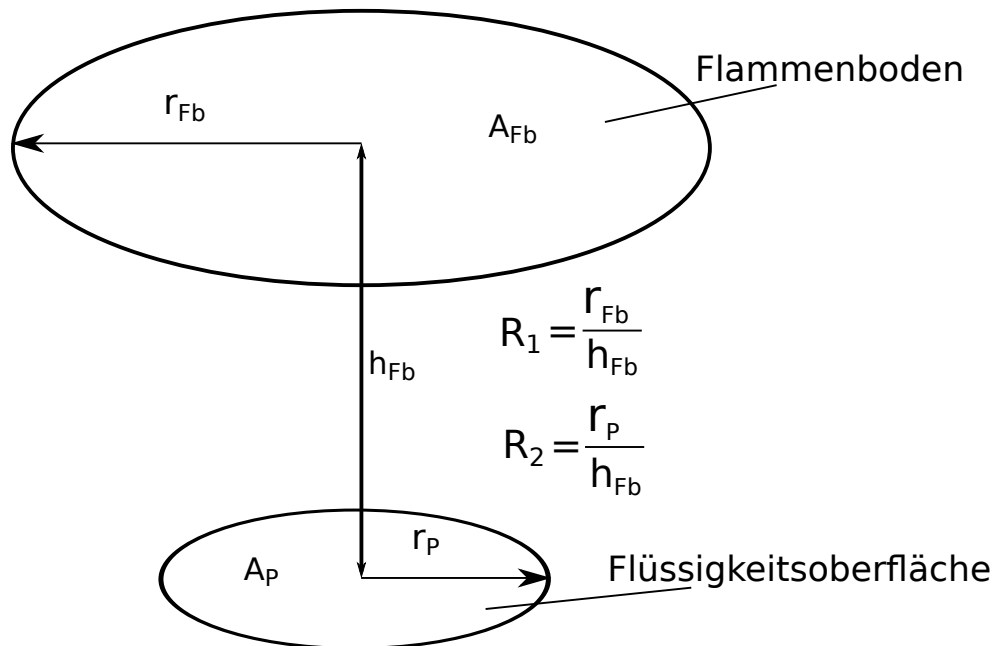


Abb. 5.8: Geometrische Verhältnisse zur Berechnung der Einstrahlzahl  $\varphi_{Fb,f}$  zwischen Flammenboden und Flüssigkeitsoberfläche bei Peroxid-Poolfeuern

Aus den Gl. 5.20 ist zu erkennen, dass die Wärmeströme  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  und  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  gegenüber  $\dot{Q}_d$  und  $\dot{Q}_{ba,rad}$  keine entscheidende Rolle spielen. Die Massenabbrandrate des DTBPs (s. Kap. 5.2.2) wird daher durch die Wärmeströme  $\dot{Q}_d$  und  $\dot{Q}_{ba,rad}$  bestimmt.

Der Wärmestrom  $\dot{Q}_d$ , der relativ wenig von  $d$  abhängig ist, ist kleiner als  $\dot{Q}_{ba,rad}$ , wodurch die relative Unabhängigkeit der Massenabbrandrate vom Pooldurchmesser im Fall organischer Peroxide erklärt werden kann. Dem gegenüber wird ein Heptan-Poolfeuer durch die Wärmeströme  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  und  $\dot{Q}_{ba,rad}$  bestimmt. Im Fall des Heptans ist der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  geringfügig größer als  $\dot{Q}_{ba,rad}$ .

Wegen der Verhältnisse  $\dot{Q}_{ba,\lambda,DTBP}/\dot{Q}_{ba,tot} = 0.09$  und  $\dot{Q}_{ba,\lambda,KW}/\dot{Q}_{ba,tot} = 0.52$  haben Wärmeleitungseffekte in DTBP-Flammen einen wesentlich geringeren Stellenwert als in KW-Flammen. Außerdem gilt, dass wegen der Verhältnisse  $\dot{Q}_{ba,rad,DTBP}/\dot{Q}_{ba,tot} = 0.53$  und  $\dot{Q}_{ba,rad,KW}/\dot{Q}_{ba,tot} = 0.44$  der Strahlungswärmerückstrom in einem DTBP-Poolfeuer dominant ist.

## 5.2 Energiebilanzen von KW- und DTBP-Einzelpoolfeuern

### 5.2.1 Massenabbrandraten von KW-Poolfeuern

Die Massenabbrandrate  $\dot{m}_{f,KW}''$  ist der dominierende Quellterm und setzt sich im Prinzip aus der Energiebilanz Gl. 2.9 und der Gln. 2.10, 5.1 mit den Vereinfachungen  $\bar{Q}_{\lambda,f} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{sen} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{ba,\alpha} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{ba,\lambda} \rightarrow 0$ ,  $\bar{Q}_{verl} \rightarrow 0$  und  $\bar{\tau}_{fp} \rightarrow 1$ , näherungsweise berechnen [15, 48, 51].

In [52] wurde die Zahlenwertgleichung  $\dot{m}_{f,KW,max}'' = \beta \frac{(-\Delta h_c)}{\Delta h_v} = 10^{-3} \frac{(-\Delta h_c)}{\Delta h_v}$  zur Beschreibung der Massenabbrandraten von KW-Poolfeuern empirisch ermittelt. Der Parameter  $\beta$  kann jedoch aus der folgenden Energiebilanz für ein strahlungskontrolliertes Poolfeuer ( $d \geq 1$  m) berechnet werden [82]:

$$S_u c_v (-\Delta h_c) = \epsilon_F \sigma T^4 + \dot{Q}_{conv} . \quad (5.21)$$

Durch Einführung des Strahlungsanteils  $f_{rad} = \epsilon_F \sigma T^4 / (\epsilon_F \sigma T^4 + \dot{Q}_{conv})$  in Gl. 5.21 wird der konvektive Wärmestrom eliminiert:

$$\frac{f_{rad} S_u c_v (-\Delta h_c)}{\epsilon_F} = \sigma T^4 . \quad (5.22)$$

Für die maximale Massenabbrandrate im Strahlungslimit gilt für KW-Poolfeuer:

$$\dot{m}_{f,KW,max}'' = \frac{\epsilon_{F,f} \varphi_{F,f} \sigma T^4}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} . \quad (5.23)$$

Wird Gl. 5.22 in Gl. 5.23 eingesetzt so erhält man:

$$\begin{aligned} \dot{m}_{f,KW,max}'' &= \frac{\epsilon_{F,f} \varphi_{F,f} f_{rad} S_u c_v}{\epsilon_F} \frac{(-\Delta h_c)}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} \\ &\equiv \beta \frac{(-\Delta h_c)}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} . \end{aligned} \quad (5.24)$$

Für den 1. Term in Gl. 5.24 werden als realistische Werte für KW-Poolfeuer  $\frac{\epsilon_{F,f}}{\epsilon_F} = 0.5$ ,  $\varphi_{F,f} = 0.4$ ,  $f_{rad} = 0.5$ ,  $S_u = 0.06$  m/s und  $c_v = \rho_v UEL = 3.1 \text{ kg/m}^3 \cdot 0.031 = 0.096 \text{ kg/m}^3$  angenommen. Die Größe  $\beta$  setzt sich somit aus den folgenden physikalischen Größen zusammen:

$$\begin{aligned} \beta &\equiv \frac{\epsilon_{F,f}}{\epsilon_F} \varphi_{F,f} f_{rad} S_u c_v = \frac{\epsilon_{F,f}}{\epsilon_F} \varphi_{F,f} f_{rad} S_u \rho_v UEL = 6.8 \cdot 10^{-4} \text{ kg/(m}^2 \text{ s)} \\ &\approx 7 \cdot 10^{-4} \text{ kg/(m}^2 \text{ s)} . \end{aligned} \quad (5.25)$$



Es ergibt sich somit die folgende Zahlenwertgleichung in der berechnete Parameter  $\beta \approx 7 \cdot 10^{-4} \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$  gut mit dem empirischen Parameter  $\beta \approx 10^{-3} \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$  übereinstimmt:

$$\dot{m}_{f,KW,\max}'' = \beta \frac{(-\Delta h_c)}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} = 7 \cdot 10^{-4} \frac{(-\Delta h_c)}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} . \quad (5.26)$$

### 5.2.2 Einfluss der thermischen Stabilität auf die Massenabbrandraten organischer Peroxide

Experimentell ist bekannt, dass die Massenabbrandraten organischer Peroxide  $\dot{m}_{f,OP}''$ , bis zu  $\approx 6$  mal höher sind als die von Kohlenwasserstoffen

$\dot{m}_{f,KW}'' \approx 0.06 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$ , wie z.B. für Kerosin:  $\dot{m}_{f,TBPB}''(d = 3 \text{ m}) / \dot{m}_{f,KW}''(d = 3 \text{ m}) \approx 5.9$  [30–32]. Zudem ist  $\dot{m}_{f,OP}''$  im Vergleich zu  $\dot{m}_{f,KW}''$  wesentlich weniger vom Durchmesser abhängig:  $\dot{m}_{f,DTBP}''(d = 3 \text{ m}) / \dot{m}_{f,\min}'' \approx 1.6$  zu  $\dot{m}_{f,KW}''(d = 3 \text{ m}) / \dot{m}_{f,\min}'' \approx 4.1$  (s. Abb. 5.9).

Die Gln. 5.24 und 5.26 sind zur Beschreibung der Massenabbrandrate organischer Peroxide-Poolfeuer nicht ausreichend. Zur Modellierung von Peroxid-Poolfeuern wird die Energiebilanz Gl. 5.21 um einen Term  $\dot{Q}_d$  für die Zersetzungsreaktion in der flüssigen Phase ergänzt:

$$S_u c_v (-\Delta h_c) + \dot{Q}_d / A_P = \epsilon_F \sigma T^4 + \dot{Q}_{\text{conv}} . \quad (5.27)$$

Durch Einführung des Strahlungsanteils  $f_{\text{rad}} = \epsilon_F \sigma T^4 / (\epsilon_F \sigma T^4 + \dot{Q}_{\text{conv}})$  in Gl. 5.27 wird auch hier der konvektive Wärmestrom  $\dot{Q}_{\text{conv}}$  eliminiert:

$$\frac{f_{\text{rad}} S_u c_v (-\Delta h_c)}{\epsilon_F} + \frac{f_{\text{rad}} \dot{Q}_d}{\epsilon_F A_P} = \sigma T^4 . \quad (5.28)$$

Für die Massenabbrandrate von Peroxid-Poolfeuern im Strahlungslimit gilt:

$$\dot{m}_{f,OP}'' = \frac{\epsilon_{F,f} \varphi_{F,f} \sigma T^4 + \dot{Q}_d / A_P}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} . \quad (5.29)$$

Durch Einsetzen von Gl. 5.28 in Gl. 5.29 erhält man:

$$\dot{m}_{f,OP}'' = \beta \frac{(-\Delta h_c)}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} + \frac{\beta}{S_u c_v} \frac{\dot{Q}_d / A_P}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} + \frac{\dot{Q}_d / A_P}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} . \quad (5.30)$$

Die Gl. 5.30 lässt sich umformen zu:

$$\dot{m}_{f,OP}'' = \frac{\beta(-\Delta h_{c,i}) + (\frac{\beta}{S_u c_v} + 1) \frac{\dot{Q}_d}{A_P}}{\Delta h_v + c_{p,v} T_v - c_{p,a} T_a} \quad (5.31)$$

Für die Berechnung von  $\beta$  müssen die Größen aus Gl. 5.25 für KW-Poolfeuer verwendet werden. Allein für die Brennstoffkonzentrationen  $c_v$  werden stoffspezifische Zahlenwerte für DTBP und TBPB herangezogen. Organische Peroxide/Luft-Gemische haben Zündgrenzen  $UEL \leq 100$  %. Sehr fette Gemische reagieren aber nicht zu  $CO_2$  und  $H_2O$ -Dampf. Neue Untersuchungen [165] zeigen, dass organische Peroxide im fetten Bereich zwei unterschiedliche Zündtemperaturen haben. Bei der ersten Zündtemperatur beginnt der thermische Zerfall der Peroxidbindung, deren Zerfallsprodukte für DTBP hauptsächlich Aceton und Ethan sind [166–168]. Die Zersetzung des TBPB führt neben  $CO_2$  hauptsächlich zu Benzol, Biphenyl, Aceton und Ethan [166]. Am zweiten Zündpunkt beginnt der bereits gut verstandene Abbau der Kohlenwasserstoffketten. Für eine kontinuierliche Flammenfortpflanzung sind daher nicht nur die Zersetzungsreaktionen in der Gasphase, sondern auch der Abbau der Zersetzungsprodukte in der Gasphase zu berücksichtigen. Daher wird die  $UEL = 14.3$  vol-% für Aceton [169] und  $UEL = 8.6$  vol-% für Benzol [169] bei der jeweiligen Verdampfungstemperatur als Basis zur Bestimmung der maximalen Brennstoffkonzentration  $c_v$  für eine kontinuierliche Flammenfortpflanzung verwendet. Mit dem idealen Gasgesetz zur Bestimmung der Dichte  $\rho_v$  des Brennstoffdampfes ergibt sich  $c_{v,DTBP} = UEL \cdot \rho_v = 0.143 \cdot 1.9 \text{ kg/m}^3 = 0.27 \text{ kg/m}^3$  für DTBP und  $c_{v,TBPB} = UEL \cdot \rho_v = 0.086 \cdot 2.4 \text{ kg/m}^3 = 0.21 \text{ kg/m}^3$  für TBPB. Hieraus resultiert mit  $-\Delta h_{c,DTBP} = 36000 \text{ kJ/kg}$  [31] sowie  $-\Delta h_{c,TBPB} = 30113 \text{ kJ/kg}$  [32] ein  $\beta_{DTBP} = 1.62 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$  für DTBP und ein  $\beta_{TBPB} = 1.32 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$  für TBPB. Mit den Wärmekapazitäten von  $c_{p,v,DTBP} = 1.7 \text{ kJ/(kg K)}$ ,  $c_{p,v,TBPB} = 1.4 \text{ kJ/(kg K)}$  [170],  $c_{p,a,DTBP} = 2.0 \text{ kJ/(kg K)}$ ,  $c_{p,a,TBPB} = 1.7 \text{ kJ/(kg K)}$  [171] und den Verdampfungsenthalpien  $\Delta h_{v,DTBP} = 212 \text{ kJ/kg}$  und  $\Delta h_{v,TBPB} = 205 \text{ kJ/kg}$  [157] resultiert aus Gl. 5.31 für DTBP eine Massenabbrandrate von  $\dot{m}_{f,DTBP}'' \approx 0.31 \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$  im Vergleich zum experimentellen Wert  $\dot{m}_{f,exp,DTBP}'' \approx 0.30 \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$  (s. Abb. 5.9). Die Gl. 5.31 liefert für das TBPB eine Massenabbrandrate von  $\dot{m}_{f,TBPB}'' \approx 0.39 \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$ , im Vergleich zum Experiment von  $\dot{m}_{f,exp,TBPB}'' \approx 0.37 \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$ .

Mit dem beschriebenen Modell Gl. 5.31 ist es erstmals möglich, die Massenabbrandraten von großen Peroxid-Poolfeuern in sehr guter Übereinstimmung mit Experimenten, vorherzusagen. Die vorhergesagten Massenabbrandraten sind zudem konservativ und somit sehr hilfreich für sicherheitstechnische Berechnungen. Eine experimentelle Auffälligkeit der aromatischen Verbindung TBPB sind die, im Vergleich zur aliphatischen Verbindung DTBP, geringere Verbrennungsenthalpie

(infolge der bereits höher oxidierten Kohlenstoffatome im Aromaten) und eine hohe Massenabbrandrate. Diese Auffälligkeit ist durch die relativ geringen Wärmekapazitäten aromatischer Verbindungen und durch die geringere Anzahl an Rotations- und Schwingungsfreiheitsgraden dieser Moleküle, berechtigt durch das ringförmige  $\pi$ -Elektronensystem, zu erklären.

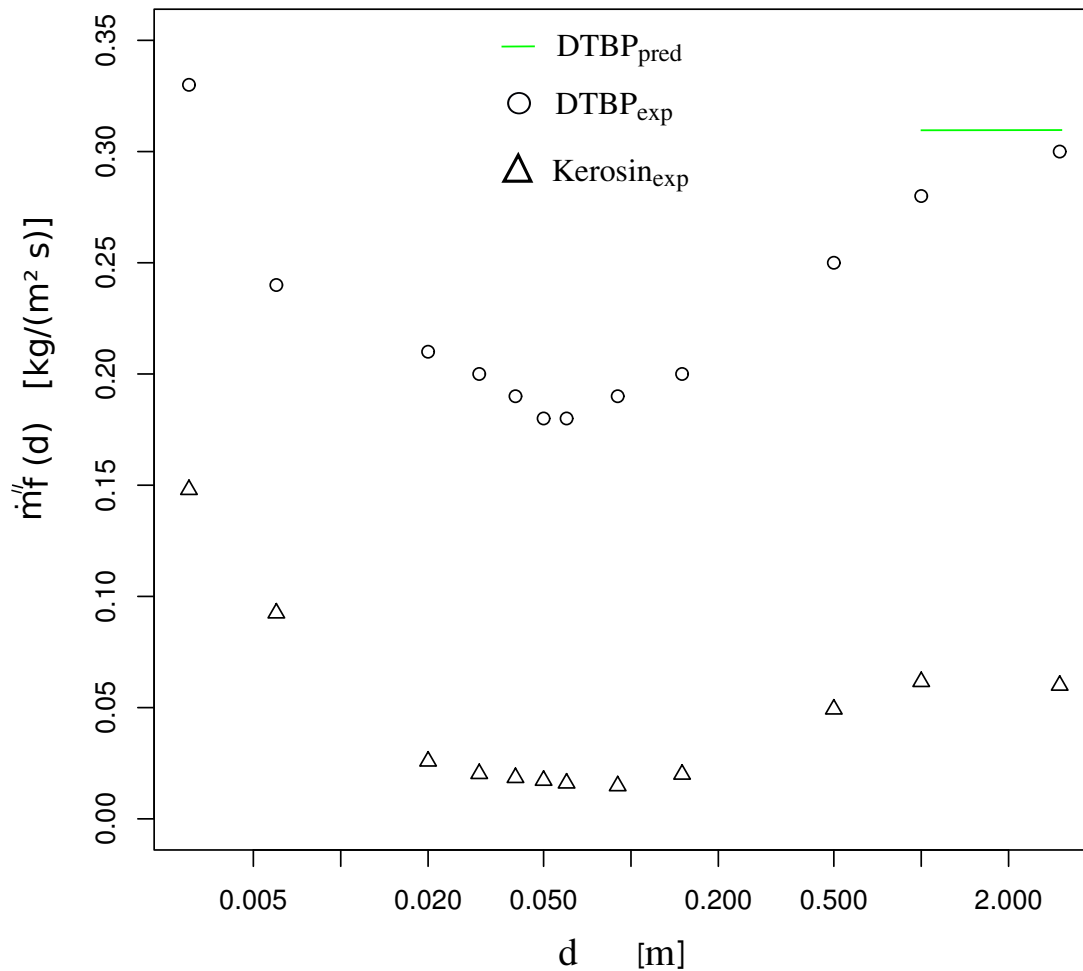


Abb. 5.9: Gemessene und vorhergesagte Massenabbrandraten  $\dot{m}''_f$  als Funktion des Pooldurchmessers  $d$  für Peroxid-Poolfeuer im Vergleich zu KW-Poolfeuern

Eine vereinfachte Schreibweise der Gl. 5.31 für den ingenieurtechnischen Gebrauch liefert:

$$\dot{m}''_{f,OP} = \frac{\beta(-\Delta h_c) + 1.1a_1}{a_2} \quad . \quad (5.32)$$

Tab. 5.2: Experimentell bestimmte Flammenlängen, Massenabbrandraten [31] und Froude-Zahlen von DTBP-Einzelpoolfeuern

d [m]	0.03	0.06	0.5	1	3
$\bar{H}/d$ [-]	14.80	12.83	7.52	5.45	3.10
$H_{\max}/d$ [-]	17.50	16.92	11.54	8.90	3.89
$\dot{m}_f''$ [kg/(m <sup>2</sup> s)]	0.18	0.20	0.26	0.28	0.30
$Fr_f$ [-]	0.24	0.20	0.09	0.07	0.04

Der Parameter  $a_1 = \dot{Q}_d/A_P = -1.27 T_{\text{onset}} + 501.07 \text{ K}$  ergibt sich als eine lineare Korrelation aus den Messwerten für DTBP und TBPB mit den von Malow und Wehrstedt [160] gemessenen Onset-Temperaturen. Es ist zu erwähnen, dass es sich bei dieser linearen Korrelation um eine starke Vereinfachung handelt, die nur in einem engen Bereich von Onset-Temperaturen gültig ist. Durch die Betrachtung der Zersetzungsprodukte in der Gasphase handelsüblicher organischer Peroxide kann nach Gl. 5.24 ein gemittelttes  $\beta = 1.5 \cdot 10^{-3}$  berechnet werden. Der Parameter  $a_2$  besteht aus dem Nenner der Gl. 5.31. Näherungsweise kann zwischen aliphatischen Stoffen mit  $a_2 = 250 \text{ kJ/kg}$  und aromatischen Stoffen mit  $a_2 = 220 \text{ kJ/kg}$  unterschieden werden.

Eine Anwendung der Gl. 5.32 auf das tert-Butylperoxy-2-ethylhexanoat (TBPEH) mit  $-\Delta h_c = 34455 \text{ kJ/kg}$ ,  $T_{\text{onset}} = 334 \text{ K}$ ,  $a_1 = 77 \text{ kW/m}^2$ ,  $\beta = 1.5 \cdot 10^{-3} \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$  und  $a_2 = 250 \text{ kJ/kg}$  liefert eine Massenabbrandrate von  $\dot{m}_{f,\text{TBPEH}}'' \approx 0.55 \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$  und ist in guter Übereinstimmung mit dem Experiment  $\dot{m}_{f,\text{exp,TBPEH}}'' \approx 0.53 \text{ kg/(m}^2 \text{ s)}$ .

### 5.3 Flammenlängenkorrelationen von DTBP-Poolfeuern

Die mit dem Intermittenzkriterium ([97], Abs. 3.4) bestimmten Flammenlängen von DTBP-Einzelpoolfeuern, als Funktion des Pooldurchmessers  $d$ , sind zusammen mit den entsprechenden Massenabbrandraten  $\dot{m}_f''$  und Froude-Zahlen  $Fr_f$  in Tab. 5.2 dargestellt. Die Daten der gemittelten Flammenlängen  $\bar{H}$  und der maximalen Flammenlängen  $H_{\max}$  (s. Tab. 5.2) wurden mit Hilfe der Gl. 2.25 korreliert, wobei aufgrund der windstillen Bedingungen während der Versuche  $c = 0$  gesetzt wird:

$$\bar{H}/d = 46.65 Fr_f^{0.80} , \quad (5.33)$$

Tab. 5.3: NMFQ und AF der verschiedenen Korrelation zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$ 

	neue Korrelation	Thomas 1	Heskestad	Fay	Muños 1
NMFQ [-]	0.007	0.031	0.780	0.476	0.794
AF [-]	-0.018	-0.083	0.319	0.197	0.474

und

$$H_{\max}/d = 56.96 \text{ Fr}_f^{0.76} . \quad (5.34)$$

Um die Qualität der vorhergesagten Flammenlängen mittels der verschiedenen Korrelationen (s. Tab. 2.2) zu überprüfen, werden die normierten mittleren Fehlerquadrate (NMFQ) und der asymmetrische Fehlerbereich (AF) gebildet, wobei  $x_e$  für den experimentellen Wert und  $x_p$  für den vorhergesagten Wert steht [172]:

$$\text{NMFQ} = \frac{1}{n} \sum_1^n \frac{(x_e - x_p)^2}{x_e x_p} , \quad (5.35)$$

und

$$\text{AF} = \frac{1}{n} \sum_1^n 2 \frac{x_e - x_p}{x_e + x_p} . \quad (5.36)$$

Das NMFQ gibt dabei den Grad der Korrelation an, wobei der AF für den Grad der Abweichung steht.

In der Abb. 5.10 werden die mit Gl. 5.33 berechneten Ergebnisse mit den experimentellen Ergebnissen aus Tab. 5.2 und den aus der Literatur bekannten Korrelationen für die gemittelten relativen Flammenlängen  $\bar{H}/d$  aus Tab. 2.2, verglichen.

Wie in Abb. 5.10 und Tab. 5.3 zu erkennen ist, unterschätzen die Heskestad und die Muños 1 Korrelation die gemittelten relativen Flammenlängen  $\bar{H}/d$  von DTBP-Poolfeuern, insbesondere für kleinere Durchmesser. Für größere Pooldurchmesser ( $d = 3 \text{ m}$ ) sind, die Vorhersagen der Heskestad und der Muños 1 Korrelation, dagegen genauer. Die Thomas 1 Korrelation gibt  $\bar{H}/d$  dagegen über den gesamten untersuchten Durchmesserbereich, relativ gut wieder. Die beste Abschätzung liefert aber die neue Korrelation Gl. 5.33, welche den kleinsten Wert für NMFQ und AF in Tab. 5.3 zeigt.

In der Abb. 5.11, werden die mit Gl. 5.34 berechneten Ergebnisse, mit den experimentellen Ergebnissen aus Tab. 5.2 und den aus der Literatur bekannten

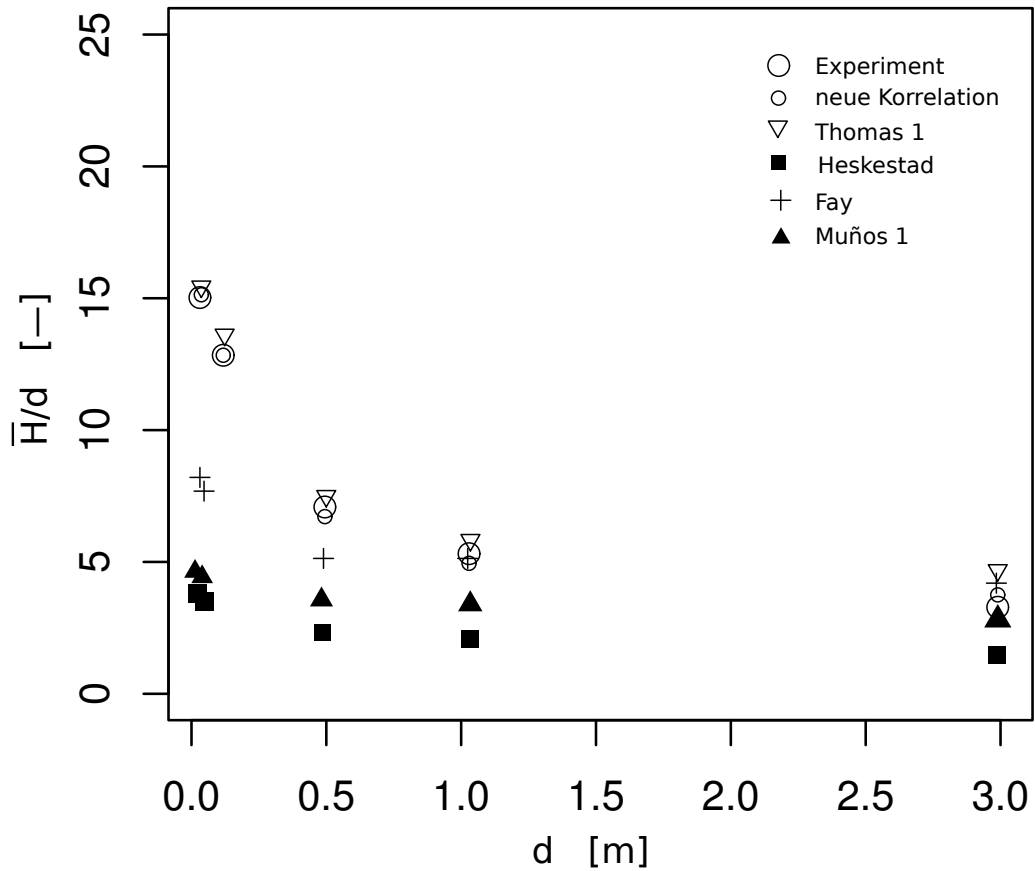
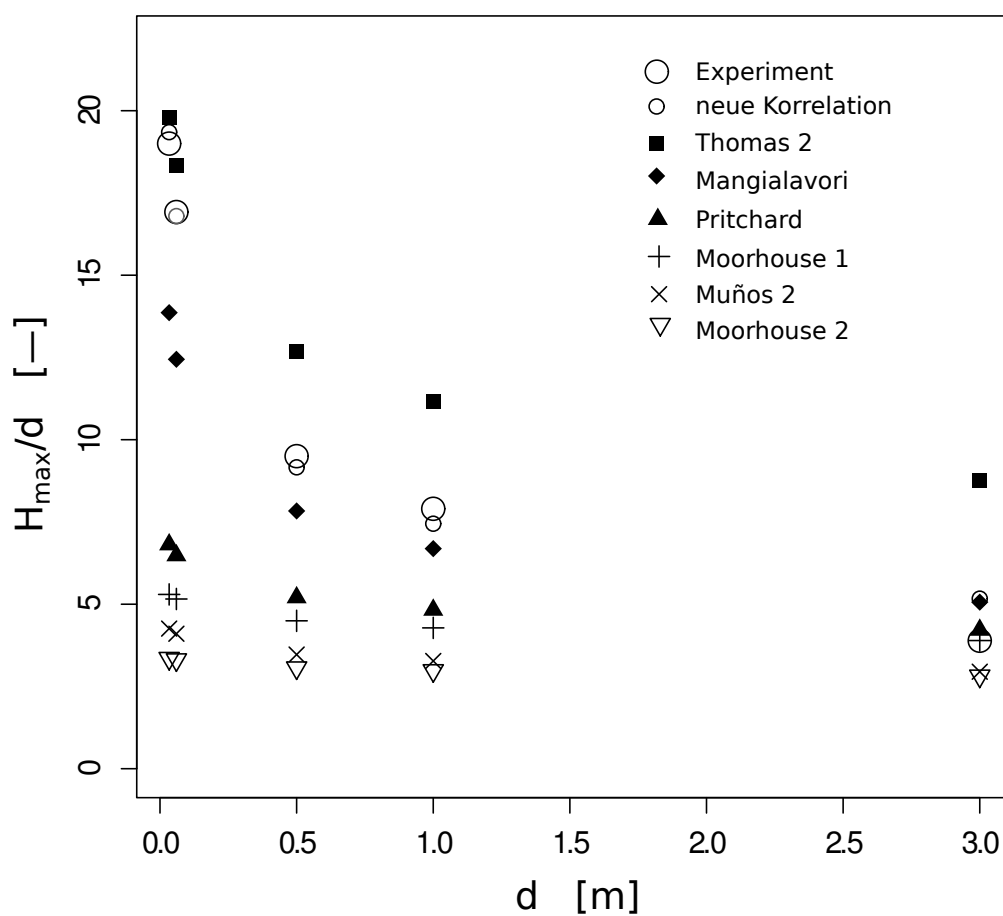


Abb. 5.10: Experimentelle und korrelierte  $\bar{H}/d$  als Funktion von  $d$

Korrelationen, für die maximalen relativen Flammenlängen  $H_{\max}/d$  aus Tab. 2.2, verglichen.

Wie in Abb. 5.11 und Tab. 5.4 zu erkennen ist, unterschätzen die Moorhouse 1, Moorhouse 2 und die Muños 2 Korrelation, die maximalen relativen Flammenlängen  $H_{\max}/d$  von DTBP-Poolfeuern. Die Mangialavori und die Thomas 2 Korrelation geben  $H_{\max}/d$  dagegen genauer wieder. Die beste Abschätzung liefert aber die neue Korrelation Gl. 5.34, welche den kleinsten Wert für NMFQ und AF in Tab. 5.4 zeigt.

Es kann also festgehalten werden, dass die von Kohlenwasserstofffeuern abgeleiteten Korrelationen  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für Peroxid-Poolfeuer unterschätzen. Daher kann es durch die im Vergleich zu KW-Poolfeuern doppelt so großen relativen Flammenlängen zu fehlerhaften Berechnungen der kritischen thermischen Abstände von Peroxid-Poolfeuern kommen, so dass für etwaige Berechnungen die neuen Korrelationen Gln. 5.33 - 5.34 genutzt werden sollten.

Abb. 5.11: Experimentelle und korrelierte  $H_{\max}/d$  als Funktion von  $d$ Tab. 5.4: NMFQ und AF der verschiedenen Korrelation zur Bestimmung von  $H_{\max}/d$ 

	neue Korrelation	Thomas2	Mangialavori	Pritchard
NMFQ [-]	0.010	0.027	0.068	0.311
AF [-]	0.007	-0.054	-0.115	0.323
	Moorhouse 1	Muños 2	Moorhouse 2	
NMFQ [-]	0.885	0.537	0.885	
AF [-]	0.689	0.469	0.689	

## 5.4 Wärmeströme und Energiebilanzen wechselwirkender KW- und DTBP-Poolfeuer

Im Folgenden wird das Phänomen der Flammenverschmelzung (-fusion) beschrieben, die zusammen mit den Flammentemperaturen wechselwirkender Feuer, einen starken Einfluss auf den Wärmerückstrom und somit auf die Massenabbrandraten hat. Zur Erklärung der Unterschiede in den Flammentemperaturen wechselwirkender Brände im Vergleich zu Einzelfeuern werden auch Konzentrationsprofile der hauptsächlich für den Brennstoffabbau verantwortlichen Spezies (Radikale) OH und CH<sub>3</sub> herangezogen.

### 5.4.1 Flammenverschmelzung

Erreicht der relative Wechselwirkungsabstand  $D/d$  zwischen mindestens zwei Feuern einen bestimmten kritischen Wert  $(D_{\text{merg}}/d)_{\text{crit}}$ , wird eine Flammenneigung in Richtung des Zentrums der wechselwirkenden Feuer beobachtet. Es kommt zu einer Verschmelzung der einzelnen Flammensäulen, zu einer gemeinsamen längeren Flammensäule. Bei der Flammenverschmelzung lassen sich drei Bereiche definieren (s. Tab. 5.5). Diese relativen Abstandsbereiche wurden experimentell im Labormaßstab durch Variation der Abstände zwischen den Pools gefunden. In den Feldversuchen zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus den Versuchen im Labormaßstab.

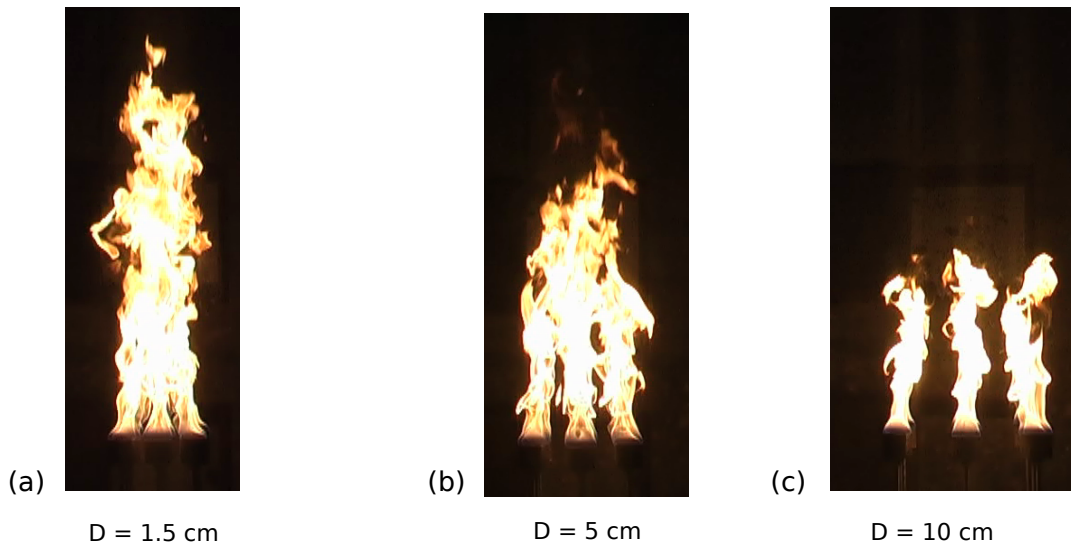
Im ersten Bereich (Merging-Bereich, kritischer relativer Abstand  $(D_{\text{merg}}/d)_{\text{crit}}$ ) kommt es während der gesamten Brenndauer zu einer Verschmelzung der einzelnen Flammen zu einer gemeinsamen Flammensäule (s. Abb. 5.13(a) für KW-Brennstoffe und Abb. 5.13(a) für Peroxide).

Im zweiten Bereich (Übergangsbereich-Bereich, kritischer Abstand  $(D_{\text{tran}}/d)_{\text{crit}}$ ) verschmelzen nicht mehr alle Einzelflammen über die gesamte Brenndauer miteinander (s. Abb. 5.13(b) für KW-Brennstoffe und Abb. 5.13(b) für Peroxide). Es wird beobachtet, dass im Übergangsbereich das Zeitintervall, in dem die Flammen miteinander verschmolzen sind, mit zunehmendem  $D/d$  stetig abnimmt. Der relative kritische Abstand  $(D_{\text{tran}}/d)_{\text{crit}}$  kann der Tab. 5.5 entnommen werden. Bemerkenswert ist, dass der Übergangsbereich der Peroxid-Feuer im Vergleich zu KW-Feuern erst bei größeren  $D/d$  beginnt und deutlich breiter ist.

Im dritten Bereich (Separiertes-Bereich, kritischer thermischer Abstand  $(D_{\text{sep}}/d)_{\text{crit}}$ ) liegen die Flammen getrennt von einander vor, so dass eine Verschmelzung während der gesamten Brenndauer nicht mehr stattfindet (s. Abb. 5.13(c) für



Wechselwirkende Feuer im Labormaßstab ( $d = 6 \text{ cm}$ ) mit  $N = 9$  Einzelfeuern



Wechselwirkende Feuer im Feldmaßstab ( $d = 1.5 \text{ m}$ ) mit  $N = 2$  Einzelfeuern

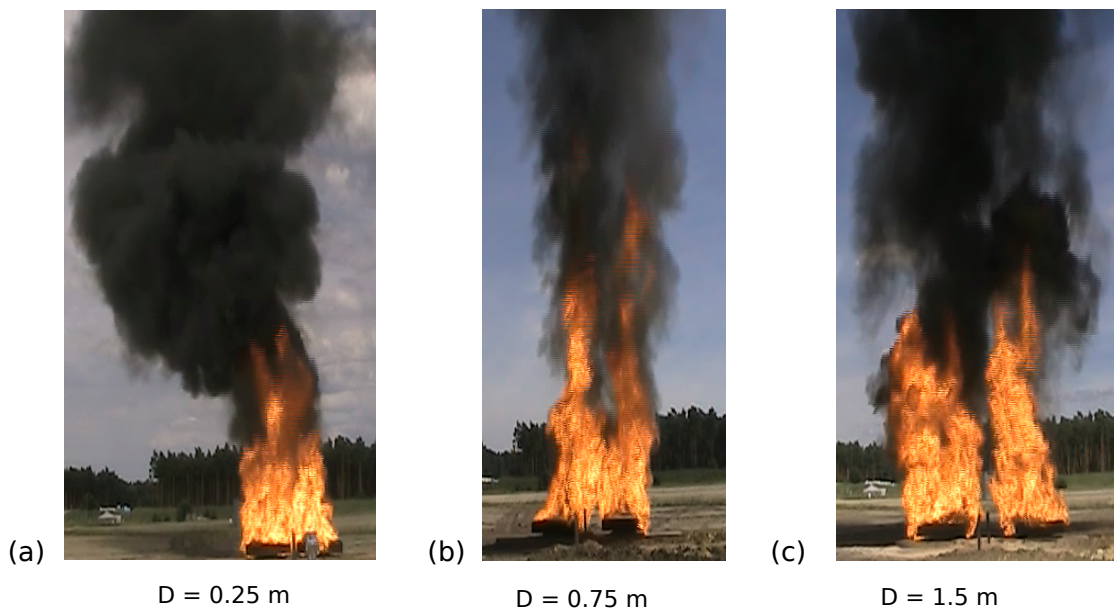


Abb. 5.12: Flammenverschmelzung von wechselwirkenden KW-Poolfeuern im Labormaßstab und im Feldmaßstab mit den drei Abstandsbereichen: (a) Merging-Bereich ( $0 < D_{\text{merg}}/d \leq 0.5$ ), (b) Übergangsbereich ( $0.5 < D_{\text{tran}}/d \leq 1.33$ ), (c) Separierter Bereich ( $1.33 < D_{\text{sep}}/d$ ). Die Flammen in den Feldversuchen sind jeweils formatfüllend aufgenommen, um eine möglichst genaue Auswertung der Flammenlängen zu gewährleisten.

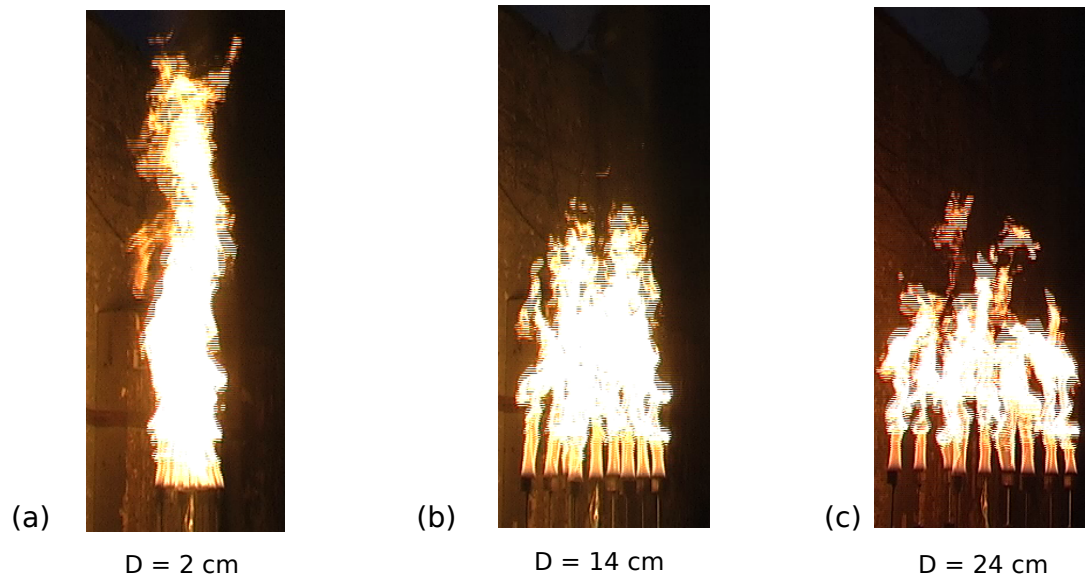
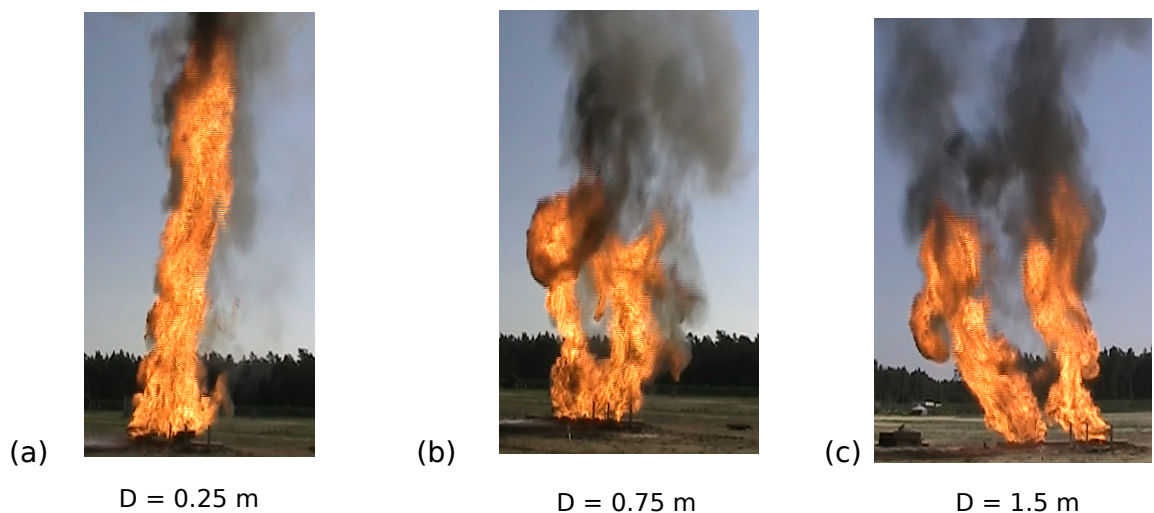
Wechselwirkende Feuer im Labormaßstab ( $d = 6 \text{ cm}$ ) mit  $N = 9$  EinzelfeuernWechselwirkende Feuer im Feldmaßstab ( $d = 1.5 \text{ m}$ ) mit  $N = 2$  Einzelfeuern

Abb. 5.13: Flammenverschmelzung von wechselwirkenden DTBP-Poolfeuern im Labormaßstab und im Feldmaßstab mit den drei Abstandsbereichen: (a) Merging-Bereich ( $0 < D_{\text{merg}}/d \leq 0.83$ ), (b) Übergangsbereich ( $0.83 < D_{\text{tran}}/d \leq 2.67$ ), (c) Separierter Bereich ( $2.67 < D_{\text{sep}}/d$ ). Die Flammen in den Feldversuchen sind jeweils formatfüllend aufgenommen, um eine möglichst genaue Auswertung der Flammenlängen zu gewährleisten.

Tab. 5.5: Kritische relative Wechselwirkungsabstände  $D/d)_{\text{crit}}$  zur Einteilung der Wechselwirkung von Feuern in drei Abstandsbereiche: Merging-Bereich mit  $(D_{\text{merg}}/d)_{\text{crit}}$ , Übergangsbereich-Bereich mit  $(D_{\text{tran}}/d)_{\text{crit}}$  und Separiert-Bereich mit  $(D_{\text{sep}}/d)_{\text{crit}}$ , abhängig von der Anzahl  $N$  wechselwirkender KW- und Peroxid-Poolfeuer

N [-]	KW			Peroxid		
	$D_{\text{merg}}/d$ [-]	$D_{\text{tran}}/d$ [-]	$D_{\text{sep}}/d$ [-]	$D_{\text{merg}}/d$ [-]	$D_{\text{tran}}/d$ [-]	$D_{\text{sep}}/d$ [-]
2	0.17	0.33	$> 0.33$	0.5	1	$> 1$
3	0.25	0.42	$> 0.42$	0.66	2	$> 2$
5	0.33	0.67	$> 0.67$	0.83	2.33	$> 2.33$
9	0.5	1.33	$> 1.33$	0.83	2.67	$> 2.67$

KW-Brennstoffe und Abb. 5.13(c) für Peroxide).

Bemerkenswert ist zudem, dass sich die Flammensäulen bei der Flammenverschmelzung nicht zuerst an der Flammenspitze, sondern im Bereich wenig oberhalb des Poolrandes berühren. Im Labormaßstab führt eine Flammenverschmelzung fast über die gesamte Flammenlänge hinweg zu einer gemeinsamen Flammensäule. Im Labormaßstab berühren sich Heptan-Flammen, in Abhängigkeit des relativen Abstandes, in einem axialen Bereich  $x > 0.05 \bar{H}$  für  $D/d = 0.1$  ( $N = 9$ ) bis zu  $x > 0.2 \bar{H}$  für  $D/d = 0.5$  ( $N = 9$ ). Bei DTBP-Feuern berühren sich die Flammen ab einer Höhe von  $x > 0.05 \bar{H}$  für  $D/d = 0.1$  ( $N = 9$ ) bis  $x > 0.25 \bar{H}$  für  $D/d = 1.33$  ( $N = 9$ ). In den Feldversuchen dagegen zeigt sich bei KW- und Peroxid-Poolfeuern, dass die Verschmelzung wenig oberhalb des Flüssigkeitsspiegels ( $x \geq 0$ ) beginnt. Für die Hexan-Flamme ergibt sich ein Höhe von  $x \approx 0.12 \bar{H}$ , während für die DTBP-Flamme eine Höhe von  $0.05 \bar{H}$  beobachtet wird. Im Bereich  $D/d < 0.17$  bildet sich eine gemeinsame Flammensäule aus.

Im Bereich  $D/d > 0.75$  entstehen für  $x > 0.8 \bar{H}$  zwei getrennte Flammensäulen, die mit einer verschmolzenen Flammenbasis verbunden sind.

Experimentell zeigt sich, dass die kritischen Wechselwirkungsabstände des Merging- und Übergangs-Bereiches vom Pooldurchmesser nur sehr wenig abhängig sind. Somit ist es möglich, die kritischen Abstände in guter Näherung abhängig von der Anzahl  $N$  der brennenden Pools, zu korrelieren:

$$(D_{\text{merg,KW}}/d)_{\text{crit}} = 0.11 N^{0.68} \quad , \quad (5.37)$$

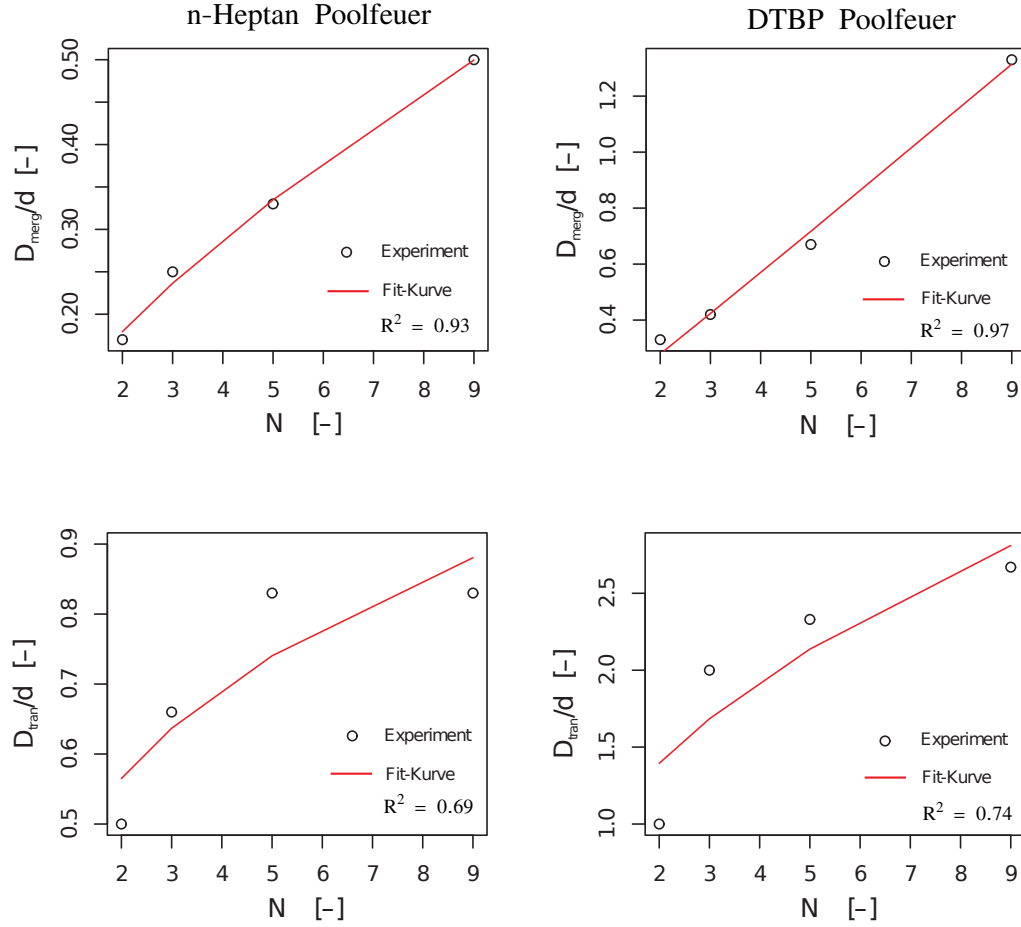


Abb. 5.14: Experimentelle Werte und Korrelationen nach Gln. 5.37 - 5.40 zur Ermittlung der relativen kritischen Abstände für den Merging-Bereich mit  $(D_{\text{merg}}/d)_{\text{crit}}$  und den Übergangs-Bereich mit  $(D_{\text{tran}}/d)_{\text{crit}}$

$$(D_{\text{tran,KW}}/d)_{\text{crit}} = 0.14 N^{1.03} \quad , \quad (5.38)$$

sowie

$$(D_{\text{merg,DTBP}}/d)_{\text{crit}} = 0.46 N^{0.29} \quad , \quad (5.39)$$

$$(D_{\text{tran,DTBP}}/d)_{\text{crit}} = 1.01 N^{0.47} \quad . \quad (5.40)$$

Diese Korrelationen sind mit den experimentellen Werten in Abb. 5.14 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Korrelationen bei wechselwirkenden KW-Poolfeuern besser wiedergegeben werden als bei Peroxid-Poolfeuern. Die kritischen Abstände für die n-Heptan Poolfeuer sind um eine Größenordnung kleiner als in [93] mit  $(D_{\text{merg}}/d)_{\text{crit}} = 6.7$ . In [93] fehlt eine Definition der Flammenverschmelzung, so dass ein Vergleich sehr schwierig ist. Der kritische Abstand  $(D_{\text{merg}}/d)_{\text{crit}} = 6.7$  für Poolfeuer in [93] erscheint jedoch als viel zu hoch, da z. B. in [84] für

Brennerflammen mit  $Re > 5000$  und somit aufgrund der wesentlich höheren Entrainment-Massenströme Abstände von  $(D_{\text{merg}}/d)_{\text{crit}} = 2$  gefunden wurden.

### 5.4.2 Flammentemperaturprofile von KW- und DTBP-Poolfeuern

Die axialen Flammentemperaturprofile  $\bar{T}_F(x, r)$  wechselwirkender n-Heptan- und DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $D/d = 0.33$  und  $N = 5$  sind in Abb. 5.15 dargestellt (s. auch Abb. 2.26). Die Flammentemperaturen des wechselwirkenden n-Heptan Poolfeuers steigen im Bereich  $0 \text{ cm} \leq r \leq 2 \text{ cm}$  über der Pooloberfläche stark an und erreichen bei  $x = 0.05$  m ein Maximum. Bei  $r = 3$  cm ist der Temperaturanstieg wesentlich geringer und ein Maximum wird erst bei  $x = 0.1$  m erreicht. Das wechselwirkende DTBP-Poolfeuer hingegen zeigt im Bereich  $0 \text{ cm} \leq r \leq 2 \text{ cm}$  ansteigende Flammentemperaturen, wobei zwischen  $0 \text{ cm} \leq r \leq 2 \text{ cm}$  kein Maximum beobachtet wird. Bei  $r = 3$  cm deutet sich ein Maximum bei  $x = 0.35$  m an. Aus diesen Temperaturprofilen lassen sich die Temperaturen des Flammenbodens für das Heptan bei  $h_{Fb} \approx 0.1$  m zu  $T_{Fb} = 1450$  K und für DTBP bei  $h_{Fb} \approx 0.3$  m zu  $\bar{T}_{Fb} = 1520$  K bestimmen. Bei den n-Heptan Poolfeuer wird bei  $r = 1$  cm eine maximale Temperatur von  $\bar{T}_{F, \text{max}} = 1633$  K erreicht, die um den Faktor 1.27 höher liegt als bei einem n-Heptan Einzelfeuer mit  $d = 6$  cm [75]. Die größte Temperaturzunahme um den Faktor 1.44 im Vergleich zu einem Einzelfeuer wird jedoch auf der Flammenachse ( $r = 0$  cm) erreicht, auf der eine Flammentemperatur von  $\bar{T} = 1582$  K vorliegt.

Da das Temperaturmaximum stark in Richtung der Flammenachse verschoben ist, zeigt sich im Vergleich zu einem n-Heptan Einzelfeuer mit  $d = 6$  cm ein unimodales Temperaturprofil mit nur sehr schwach ausgeprägtem M-Charakter. Das hier untersuchte wechselwirkende n-Heptan Feuer zeigt somit ein Verhalten, das für Poolflammen mit größerem Durchmesser typisch ist, bei denen das Temperaturmaximum auf der Flammenachse liegt (z. B.  $d = 30$  cm [75]). Es kann außerdem beobachtet werden, dass sich die Temperaturen im äußeren Bereich der Flamme ( $r = 3$  cm) zwar verringern, im Vergleich zu einem Einzelfeuer aber wesentlich heißer sind, bedingt durch die benachbarten Flammen.

In einem wechselwirkenden n-Heptan Poolfeuer sind die Einzelflammen zwar zu einer Flammensäule verschmolzen, können aber durch die geringeren Temperaturen bei  $r = 3$  cm voneinander unterschieden werden. Der hohe Temperaturpeak kann durch verschiedene Effekte erklärt werden. Zwischen den einzelnen Flammensäulen entsteht ein Unterdruck, der zu einem erhöhten Luft-Entrainment führt. Durch die Poolabstände zwischen den Flammen kann Luft in die Zwischenräume gelangen. Diese Luft transportiert zum einen zusätzlichen Sauerstoff

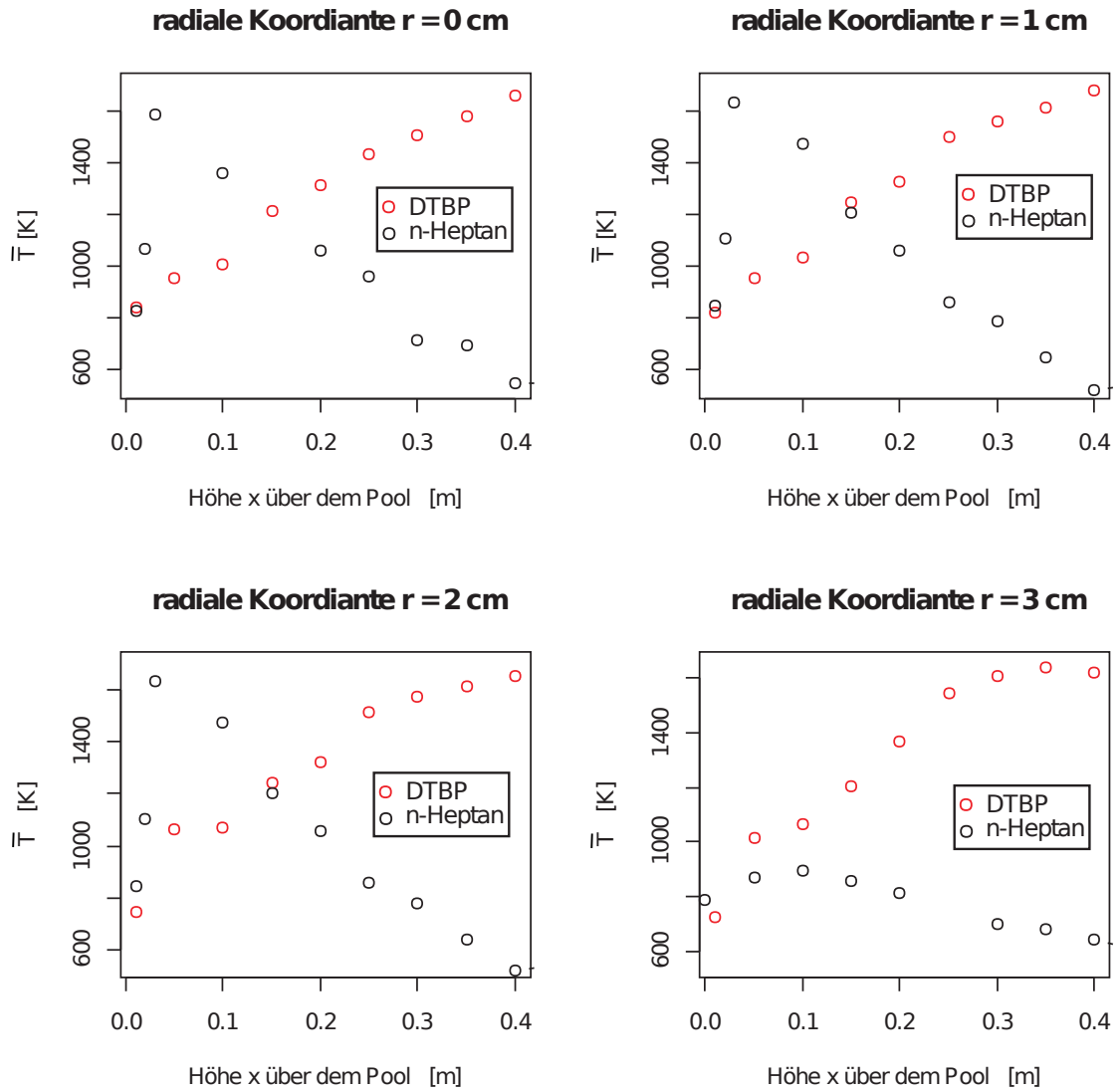


Abb. 5.15: Gemessene Flammentemperaturprofile  $\bar{T}_F(x, r)$  wechselwirkender n-Heptan und DTBP-Poolfeuer,  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$

in die Mitte der Flamme, wo bei einem Einzel-Poolfeuer der gleichen Brennstoffoberfläche Sauerstoffmangel herrschen würde. Dieser zusätzliche Sauerstoff führt im Falle der wechselwirkenden Heptanflammen zu einer erhöhten Umsetzung des Brennstoffs und somit zu einer Temperaturzunahme. Des Weiteren wird die Temperaturzunahme dadurch begünstigt, dass die angesaugte Umgebungsluft durch die benachbarten Flammen bereits zum Teil vorgewärmt wird. Hierdurch wird folglich auch eine geringere Energie zur Erwärmung des Stickstoffanteils in der Luft benötigt.

Das wechselwirkende DTBP-Poolfeuer zeigt im Vergleich zu einem Einzelfeuer mit  $d = 6$  cm eine sehr ähnliche axiale Temperaturverteilungen für die einzelnen radialen Positionen. Durch die vergleichsweise hohen Temperaturen auch bei  $r = 3$  cm wirkt ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer wie eine gemeinsame Flammensäule. Im unteren Bereich des wechselwirkenden Feuers zeigt sich, dass die in einer Höhe  $x < 10$  cm im Einzelfeuer auftretenden Temperaturpeaks (s. Abb. 5.4) im Bereich  $2 \text{ cm} \leq r \leq 3 \text{ cm}$  nicht zu erkennen sind. Stattdessen fällt im Bereich  $0 \text{ cm} \leq r \leq 3 \text{ cm}$  eine ähnliche axiale Temperaturverteilung auf, deren Temperaturen um  $\approx 65 \text{ K}$  höher sind als die in einem Einzelfeuer. Der Wegfall der Temperaturpeaks bei wechselwirkenden Flammen lässt sich durch ein stärkeres Luft-Entrainment, bedingt durch den zusätzlichen Unterdruck zwischen den Flammensäulen, erklären. Der untere Bereich der wechselwirkenden DTBP-Flamme ist charakterisiert durch die im ersten Schritt stattfindende Zersetzung des Peroxides, welche zu einem sehr fetten Aceton/Ethan/Luft-Gemisch führt. Die somit entstehenden hohen Aceton/Ethan-Konzentrationen führen dazu, dass die Zersetzungsprodukte nicht weiter reagieren können, da die obere Explosionsgrenze der Zersetzungsprodukte überschritten ist. Die C-Kettenabbauprozesse beginnen daher im Einzelfeuer am Rand der Flamme, wo sich Sauerstoff und Brennstoff mischen. Durch das erhöhte Luft-Entrainment bei wechselwirkenden Feuer kommt es zu einer besseren Durchmischung und somit zu einer homogenen axialen Flammentemperaturverteilung, da Sauerstoff vermehrt in das Flammeninnere gelangen kann. Das erhöhte Luft-Entrainment ist auch dadurch bedingt, dass die Umgebungsluft, wie bereits beschrieben, in die Räume zwischen den Pools eindringen kann, welches ebenfalls zu höheren Flammentemperaturen führt. Die Temperaturerhöhungen im Bereich  $x < 10$  cm sind bei wechselwirkenden DTBP-Flammen im Vergleich zu wechselwirkenden Heptan-Flammen wesentlich kleiner, da das Brennstoff/Luft-Verhältnis aufgrund der höheren Brennstoffkonzentrationen im Falle des DTBPs größer ist. In wechselwirkenden DTBP-Poolfeuern steigen die Zersetzungsprodukte in größere Höhen auf bevor sie chemisch reagieren können.

Es zeigt sich, dass die Temperaturzunahme in einer Höhe von  $x = 20$  cm größer ist, wobei im Bereich zwischen  $0 \text{ cm} \leq r \leq 2 \text{ cm}$  eine Erhöhung um  $\Delta T \approx 100 \text{ K}$

beobachtet wird, bei  $r = 3$  cm beträgt die Erhöhung  $\Delta T \approx 200$  K. In dieser Höhe übersteigt die Temperatur des wechselwirkenden DTBP-Feuers die des Heptanfeuers, da im Zusammenwirken einer höheren Brennstoffkonzentration und einer erhöhten Luftzufuhr die Verbrennung effizienter wird. Es kommt zu einer Verschiebung des axialen Temperaturmaximums in größeren Höhen  $x$ , wobei eine maximale Temperatur von  $T_{F,\max} = 1677$  K erreicht wird. Es werden insgesamt Temperaturzunahmen um den Faktor 1.4 erzielt, wobei davon auszugehen ist, dass sie sich mit ansteigender axialer Position noch erhöhen. Die typischerweise auch bei DTBP-Einzelpoolfeuern mit  $d = 6$  cm zu beobachtenden radialen M-Profile treten bei wechselwirkenden Feuer nicht auf.

### 5.4.3 CFD-vorhergesagte Flammentemperaturprofile eines KW-Poolfeuers

Das CFD-vorhergesagte, zeitlich-gemittelte Temperaturfeld eines wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  ist in Abb. 5.16 dargestellt. Es zeigt sich jeweils über den äußeren Pools (s. Abb. 2.26) ein lokales Temperaturmaximum bei  $x \approx 3$  cm mit Temperaturen von  $\bar{T} \approx 1600$  K. Das absolute Temperaturmaximum befindet sich über dem mittleren Pool in einer Höhe von  $x \approx 7.5$  cm mit einer Temperatur von  $\bar{T} \approx 1950$  K. Ein Vergleich der experimentellen Flammentemperaturen mit der CFD-Simulation für ein wechselwirkendes n-Heptan Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  sind in Abb. 5.17 dargestellt. Es zeigt sich, dass die Lage der absoluten Maxima der Temperaturverläufe richtig wiedergegeben werden. Die Maximalwerte der CFD-Simulation liegen über denen der experimentellen Flammentemperaturen. Dies ist durch die Trägheit der Thermoelemente (Durchmesser der Thermoperle) bedingt, die zu einer niedrigeren Flammentemperatur führt. Insbesondere in der weniger heißen Plume-Zone ( $x > 0.1$  m) stimmen die vorhergesagten Temperaturen gut mit den Messungen überein.

### Validierung der CFD-Simulation

Neben dem optischen Vergleich der Abb. 5.17 kann die Abweichung der CFD-Simulation im Vergleich zu den experimentellen Werten berechnet werden, welches eine wesentlich genauere Form der Validierung darstellt. Hierzu werden nach [173] die Konfidenzintervalle für die Abweichung zwischen der Simulation und dem Experiment berechnet:

$$\Delta \bar{T} = (\bar{T}_{\text{CFD}}(x, y) - \bar{T}_{\text{exp}}(x, y)) \pm z_{0.05, n} \frac{s}{\sqrt{n}} \quad . \quad (5.41)$$

Hierin ist  $s$  die Standardabweichung der experimentellen Ergebnisse auf Basis von  $n$  Messpunkten sowie  $z$  der Erwartungswert eines normalverteilten Merkmals.



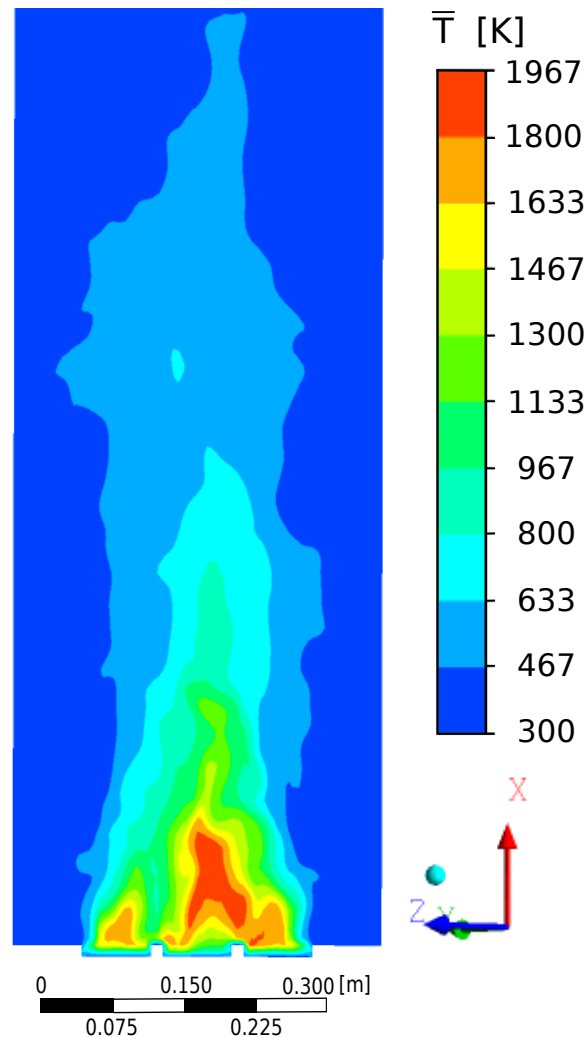


Abb. 5.16: CFD-vorhergesagtes, zeitlich-gemittelttes Temperaturfeld  $\bar{T}(x, r)$  eines n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  (Merging-Bereich)

Die Flammentemperatur bietet sich für eine solche Untersuchung besonders an, da sie sowohl stark vom Reaktionsmechanismus abhängig und gleichzeitig fundamental für die thermische Strahlung ist. Die Flammentemperatur kann somit als "system response quantity" angenommen werden. Aus Gl. 5.41 ergibt sich der absolute Fehler als halbe Breite  $\Delta\bar{T} = 51$  K des Konfidenzintervalls. Es ergibt sich ein gemittelter, relativer Fehler von  $(\Delta\bar{T}/\bar{T}_{\text{exp}})_{\text{av}} = 0.20$ , der für Flammen akzeptabel ist.

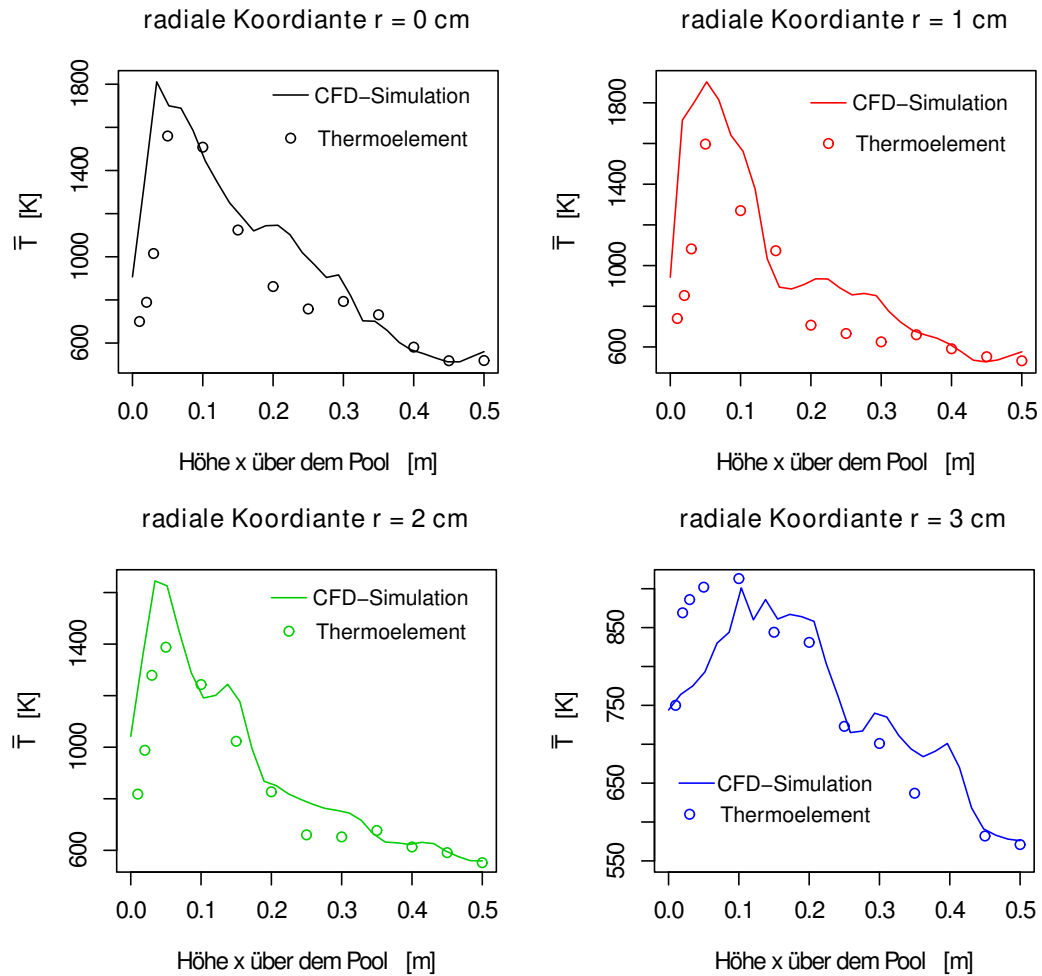


Abb. 5.17: Zeitlich-gemittelte Temperaturprofile eines wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  (Merging-Bereich)

#### 5.4.4 Vorhergesagte Konzentrationsfelder von $O_2$ , $OH$ -, $CH_3$ -Radikalen in einem KW-Poolfeuer

##### $O_2$ -Konzentrationsfeld

Die zeitlich-gemittelten Massenanteile  $\bar{\gamma}_{O_2}$  an Sauerstoff  $O_2$  eines wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  sind in Abb. 5.18 dargestellt. Die zeitlich-gemittelten Massenanteile  $\bar{\gamma}_{O_2}$ -Molekülen der äußeren Flammen zeigen auf der Flammenachse bis in eine Höhe von  $x = 3.5$  cm mit  $\bar{\gamma}_{O_2} = 0$  einen Sauerstoffmangel. Der Sauerstoffmangel mit  $\bar{\gamma}_{O_2} = 0$  reicht in der mittleren Flamme bis in eine Höhe von  $x = 11$  cm. Zwischen

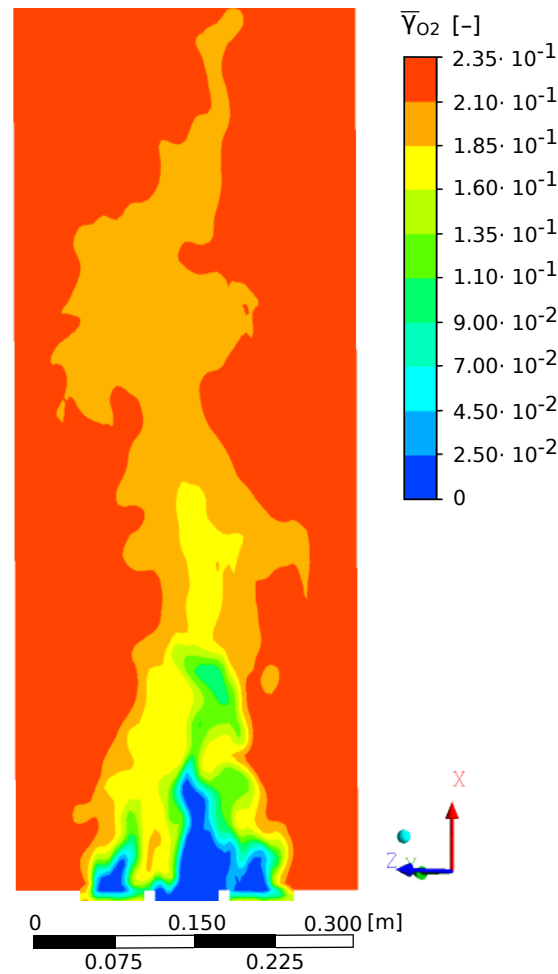


Abb. 5.18: Zeitlich-gemittelte Massenanteile  $\bar{\gamma}_{O_2}(x,y)$  an  $O_2$  eines n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  (Merging-Bereich)

den Pools sind Zonen mit erhöhtem  $\bar{\gamma}_{O_2}$  zu erkennen, wobei Werte bis zu  $\bar{\gamma}_{O_2} \leq 0.2$  erreicht werden. Es kann somit gezeigt werden, dass sich im Vergleich zum Einzelfeuer höhere Sauerstoffmassenanteile an Stellen befinden, an denen ansonsten Sauerstoffmangel herrschen würde. Dieser erhöhte Sauerstoffanteil hat einen Einfluss auf die Art der sich bildenden Spezies, die am Abbau der KW-Ketten beteiligt sind.

### CH<sub>3</sub>-Konzentrationsfeld

Die zeitlich-gemittelten Massenanteile  $\bar{\gamma}_{CH_3}$  an CH<sub>3</sub>-Radikalen eines wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  (Merging Bereich) sind in Abb. 5.19 dargestellt. Auf der Flammenachse der äußeren Pools zeigen

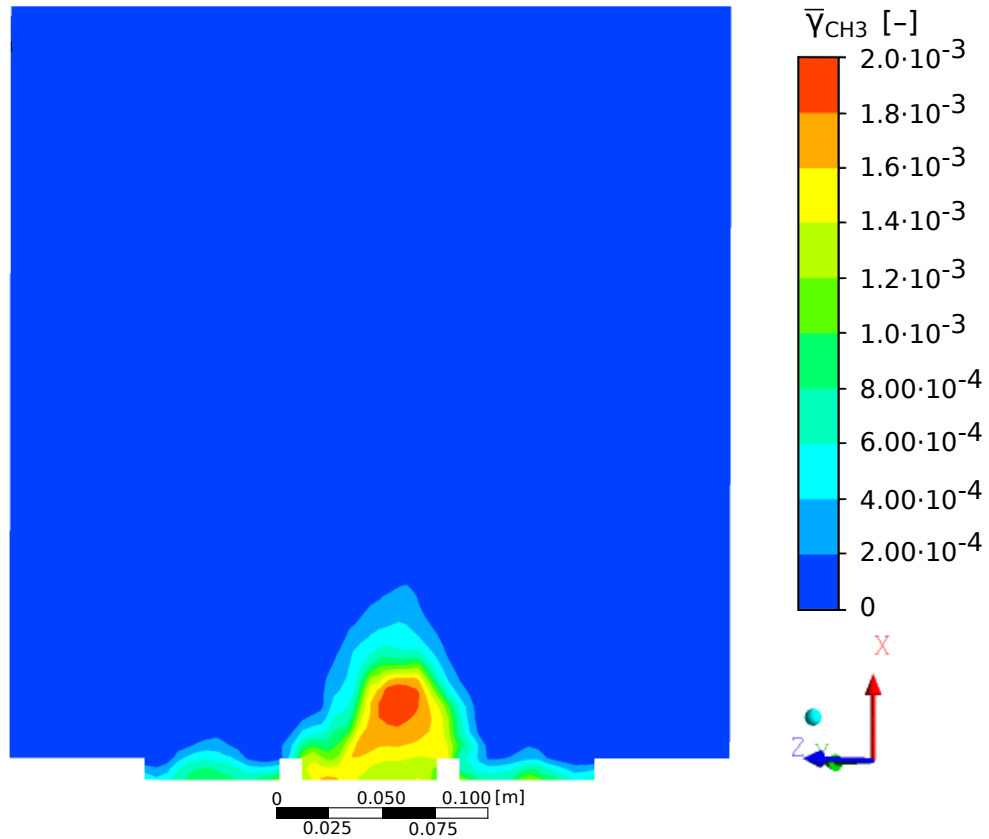


Abb. 5.19: Zeitlich-gemittelte Massenanteile  $\bar{\gamma}_{\text{CH}_3}(x, y)$  an  $\text{CH}_3$ -Radikalen eines n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  (Merging Bereich)

sich geringe  $\text{CH}_3$ -Konzentrationen mit den Werten  $\bar{\gamma}_{\text{CH}_3} < 1.5 \cdot 10^{-3}$ . Über dem mittleren Pool steigt die Massenfraktion  $\bar{\gamma}_{\text{CH}_3}$  auf der Flammenachse an und erreicht bei  $x = 2.5$  cm ein lokales Maximum mit  $\bar{\gamma}_{\text{CH}_3} = 2 \cdot 10^{-3}$ . Es kann festgestellt werden, dass  $\text{CH}_3$  als Crack-Produkt, eine Hauptspezies beim Brennstoffabbau im unteren Bereich der Flamme darstellt, insbesondere in Regionen mit Sauerstoffmangel.

### OH-Konzentrationsfeld

Die zeitlich-gemittelten Massenanteile an OH-Radikalen  $\bar{\gamma}_{\text{OH}}$  eines wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  sind in Abb. 5.20 dargestellt. Durch das im Vergleich zur Einzelflamme relativ große  $\bar{\gamma}_{\text{O}_2}$  ist die Bildung von OH-Radikalen, die die Reaktionszone anzeigen, bevorzugt möglich. Dabei steigt  $\bar{\gamma}_{\text{OH}}$  über den äußeren Pools stark an und erreicht mit  $\bar{\gamma}_{\text{OH}} \approx 1.1 \cdot 10^{-3}$  ein Maximum bei  $x \approx 2.5$  cm. In der mittleren Flamme kommt

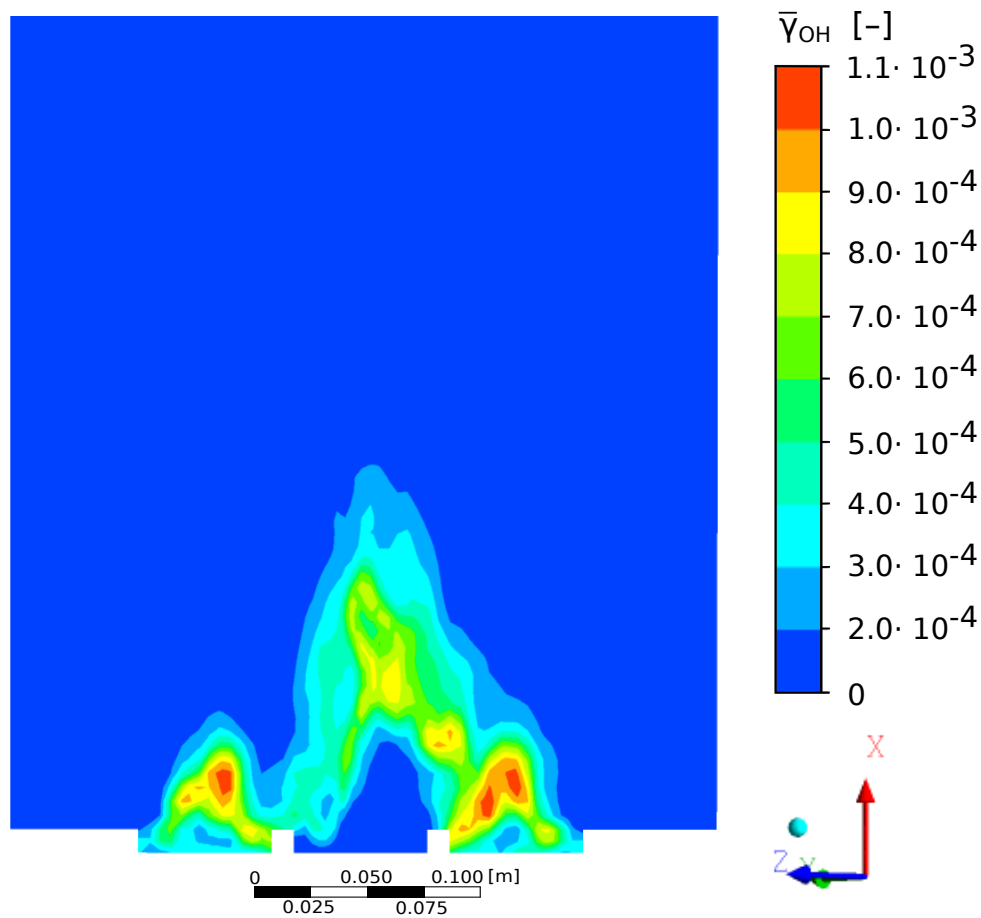


Abb. 5.20: Zeitlich-gemittelte Massenanteile  $\bar{\gamma}_{OH}(x, y)$  an OH-Radikalen eines wechselwirkenden-Heptan-Poolfeuers  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  (Merging-Bereich)

es erst durch den bei  $x \approx 4$  cm eindringenden Sauerstoff zur Bildung von OH-Radikalen. Für  $x > 4$  cm steigt  $\bar{\gamma}_{OH}$  an und erreicht bei  $x \approx 7.5$  cm mit  $\bar{\gamma}_{O_2} = 9 \cdot 10^{-4}$  ein lokales Maximum. Durch den zwischen den Pools eindringenden Sauerstoff ist an diesen Stellen die Bildung von OH-Radikalen möglich, welches ein wechselwirkendes Feuer von einem Einzelfeuer mit gleicher Brennstoffoberfläche unterscheidet. Zwischen den Pools sind Massenanteile von  $\bar{\gamma}_{OH} = 6 \cdot 10^{-4}$  möglich. Dies führt zu einem stärkeren Abbau des Brennstoffes und somit zu einer zusätzlichen Wärmefreisetzung, die zu einem Temperaturanstieg und einen damit verbundenen Anstieg der SEP und einer Verkleinerung der Flammenlänge führt.

### 5.4.5 Berechnung des Wärmerückstroms eines KW-Poolfeuers

Zum besseren Verständnis der Zusammenhänge in wechselwirkenden Feuern sollen die Wärmerückströme für den inneren Pool eines wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuers mit  $N = 5$ ,  $d = 6$  cm,  $D/d = 0.33$ ,  $\dot{m}_f'' = 0.0354$  kg/(m<sup>2</sup> s) berechnet werden. Zur Berechnung des Wärmestromes  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  wird als maßgebliche Temperatur der Gasphase über der Flüssigkeit ein Wert von  $T_g = 600$  K nach Abb. 5.15 angenommen. Der Wärmeübergangskoeffizient zwischen der Gasphase und der Flüssigkeit wird nach [48] mit  $\alpha_{g,f} \approx 6$  W/(m<sup>2</sup> K) abgeschätzt, so dass sich nach Gl. 5.2 der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  berechnen lässt:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ba,\alpha} &= \alpha_{g,f} A_P (T_g - T_v) \\ \dot{Q}_{ba,\alpha} &= 6 \text{ W/(m}^2 \text{ K)} \cdot 2.83 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot (600 \text{ K} - 381 \text{ K}) \\ &\approx 3.5 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.42}$$

Da sich die Wandtemperatur in einem wechselwirkendem Feuer nur sehr gering ändert, kann der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  analog zu Gl. 5.3 berechnet werden. Aus [161] lässt sich ein Temperaturgradient in der Poolwand von  $dT/dx_f \approx 800$  K/m abschätzen. Zusammen mit einem Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten  $\lambda_w \approx 21$  W/(m K) (für X6CrNi18-11) und einer Querschnittsfläche der Poolwand von  $A_w = 3 \cdot 10^{-4}$  m<sup>2</sup> ergibt sich ein  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$ :

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ba,\lambda} &= \lambda_w A_w (-dT/dx_f) \\ &\approx 21 \text{ W/(m K)} \cdot \pi(0.032^2 - 0.03^2) \text{ m}^2 \cdot 800 \text{ K/m} \\ &\approx 6.5 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.43}$$

Der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,\text{rad}}$  ergibt sich analog zu Gl. 5.4. Die Einstrahlzahl wird mit  $\varphi_{F,f} = 0.036$  berechnet. Als Extinktionskoeffizient wird  $k\beta = 1.39$  m<sup>-1</sup> [15] für Heptan gewählt. Die Flammenbodenoberfläche  $A_{FB} = 0.020$  m<sup>2</sup> ergibt sich nach Tab. 5.6. Als Flammentemperatur wird eine mittlere Temperatur von  $T_F = 1450$  K aus Abb. 5.15 genutzt. Hieraus ergibt sich bei Nutzung eines effektiven Durchmessers  $d_{\text{eff}} = d_{FB} = 2(D + d)$  nach Tab. 5.6 ein  $\dot{Q}_{ba,\text{rad}}$  von:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ba,\text{rad}} &= \varphi_{F,f} (1 - e^{-k\beta d_{\text{eff}}}) A_{FB} \sigma (T_F^4 - T_{bp}^4) \\ &\approx 0.036 \cdot 0.2 \cdot 0.02 \text{ m}^2 \cdot 5.6 \cdot 10^{-8} \text{ W/(m}^2 \text{ K}^4) \\ &\quad (1450^4 \text{ K}^4 - 381^4 \text{ K}^4) \\ &\approx 35 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.44}$$

Aus Gln. 5.42 - 5.44 folgt ein gesamter Wärmerückstrom für ein wechselwirkendes n-Heptan-Poolfeuer von:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ba,\text{tot}} &= \dot{Q}_{ba,\alpha} + \dot{Q}_{ba,\lambda} + \dot{Q}_{ba,\text{rad}} \\ &\approx 3.5 \text{ W} + 6.5 \text{ W} + 35 \text{ W} \approx 45 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.45}$$

Es zeigt sich somit, dass in einem wechselwirkendem Heptan-Feuer die Wärmeströme durch Wärmeübergang  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  und Wärmeleitung  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  in der gleichen Größenordnung sind. Während die Wärmeleitung als konstant angenommen werden kann, gewinnt der Wärmeübergang durch höhere Temperaturen in der Gasphase direkt über dem Pool etwas an Bedeutung. Die treibende Kraft ist aber der Wärmerückstrom durch Strahlung  $\dot{Q}_{ba,rad}$  der ca. 78 % des gesamten Wärmerückstromes ausmacht. Es kann daher gefolgert werden, dass wechselwirkende Feuer wesentlich mehr durch Wärmestrahlung bestimmt werden, als ein Einzelfeuer.

### 5.4.6 Berechnung des Wärmerückstroms eines DTBP-Poolfeuers

Zum weiteren Vergleich werden nun auch die Wärmerückströme des mittleren Pools eines wechselwirkenden DTBP-Poolfeuers mit  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $D/d = 0.33$  und  $\dot{m}_f'' = 0.2560$  kg/(m<sup>2</sup> s) aufgestellt. Der Wärmestrom  $\dot{Q}_d$  lässt sich dabei nach Gl. 5.9 berechnen:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_d &= U A_P \dot{m}_f'' (-\Delta h_d) \\ &\approx 0.062 \cdot 2.83 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot 0.26 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s}) \cdot 1.365 \cdot 10^6 \text{ J/kg} \\ &\approx 61 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.46}$$

Zur Berechnung des Wärmestromes  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  wird als maßgebliche Temperatur der Gasphase über der Flüssigkeit ein Wert von  $T_g = 750$  K nach Abb. 5.15 angenommen. Für den Wärmeübergangskoeffizient zwischen der Gasphase und der Flüssigkeit wird derselbe Wert wie für ein KW-Poolfeuer nach Hottel [48] mit  $\alpha_{g,f} \approx 6$  W/(m<sup>2</sup> K) verwendet, so dass sich nach Gl. 5.2 ein Wert von  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  ergibt:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ba,\alpha} &= \alpha_{g,f} A_P (T_g - T_v) \\ &\approx 6 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}) \cdot 2.83 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot (750 \text{ K} - 381 \text{ K}) \\ &\approx 6 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.47}$$

Da sich die Wandtemperatur in einem wechselwirkendem Feuer nur sehr gering ändert, kann der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  analog zu Gl. 5.3 berechnet werden, wobei sich für  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  ergibt:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{ba,\lambda} &= \lambda_w A_w (-dT/dx_f) \\ &\approx 21 \text{ W}/(\text{m K}) \cdot \pi(0.032^2 - 0.03^2) \text{ m}^2 \cdot 800 \text{ K/m} \\ &\approx 12 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.48}$$

Der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,rad}$  ergibt sich analog zu Gl. 5.4. Die Einstrahlzahl wird mit  $\varphi_{F,f} = 0.035$  berechnet. Die Flammenbodenoberfläche  $A_{FB} = 0.020$  m<sup>2</sup> ergibt

sich nach Tab. 5.7. Als Extinktionskoeffizient wird  $k\beta = 2.24 \text{ m}^{-1}$  [15] für Aceton als Hauptzersetzungsprodukt gewählt. Als Flammentemperatur wird eine mittlere Temperatur von  $T_F = 1550 \text{ K}$  (nach Abb. 5.15) genutzt. Mit einem effektiven Durchmesser von  $d_{\text{eff}} = d_{\text{fb}} = 2(D + d)$  ergibt sich nach Tab. 5.6 ein  $\dot{Q}_{\text{ba,rad}} \approx 98 \text{ W}$ .

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{\text{ba,rad}} &= \varphi_{\text{F,f}}(1 - e^{-k\beta d_{\text{eff}}}) A_{\text{Fb}} \sigma(T_F^4 - T_{\text{bp}}^4) \\ &\approx 0.035 \cdot 0.41 \cdot 0.02 \text{ m}^2 \cdot 5.6 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4) \\ &\quad (1550^4 \text{ K}^4 - 381^4 \text{ K}^4) \\ &\approx 92 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.49}$$

Aus Gln. 5.46 - 5.49 folgt ein gesamter Wärmerückstrom für ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer von:

$$\begin{aligned}\dot{Q}_{\text{ba,tot}} &= \dot{Q}_{\text{d}} + \dot{Q}_{\text{ba,\alpha}} + \dot{Q}_{\text{ba,\lambda}} + \dot{Q}_{\text{ba,rad}} \\ &\approx 61 \text{ W} + 6 \text{ W} + 12 \text{ W} + 92 \text{ W} \approx 171 \text{ W} .\end{aligned}\tag{5.50}$$

Es zeigt sich somit, dass in einem wechselwirkendem DTBP-Feuer der Wärmestrom durch Wärmeübergang  $\dot{Q}_{\text{ba,\alpha}}$  unbedeutend ist. Der Wärmestrom durch Wärmeleitung  $\dot{Q}_{\text{ba,\lambda}}$  verliert an Bedeutung, während sich der Wärmestrom  $\dot{Q}_{\text{d}}$  im Vergleich zum Einzelfeuer leicht erhöht. Die treibende Kraft ist aber der Wärmerückstrom durch Strahlung  $\dot{Q}_{\text{ba,rad}}$ , der hier ca. 54 % des gesamten Wärmerückstromes ausmacht. Dennoch ist der Wärmerückstrom durch Strahlung sowie der Wärmerückstrom durch Zersetzung in der Flüssigkeit in der gleichen Größenordnung.

#### 5.4.7 Massenabbrandraten von KW-Poolfeuern

Die Massenabbrandraten bei wechselwirkenden Poolfeuern lassen sich im Prinzip ebenfalls mit der Gl. 5.24 berechnen. Allerdings müssten hierfür alle beteiligten Wärmeströme sowie die Flammentemperaturen jeweils in Abhängigkeit vom relativem Abstand  $D/d$  bekannt sein. Leider liegen hierzu weder Messungen noch Berechnungen auch nur ansatzweise vor. Deshalb werden im folgenden ausschließlich die gemessenen Massenabbrandraten  $\dot{m}_f''(D/d)$  vorgestellt.

Die gemessenen Massenabbrandraten  $\dot{m}_f''$  wechselwirkender KW-Poolfeuer können der Abb. 5.21 entnommen werden, wobei der geometrische Aufbau der Versuche in Abb. 2.26 erklärt ist. Bei einem Abstand von  $D/d = 0$  ist jeweils ein Referenzfeuer mit einem Radius  $d_{\text{eq}}$  entsprechend der gleichen Brennstoffoberfläche wie das wechselwirkende Feuer aufgetragen. Wechselwirkende n-Heptan-Poolfeuer mit



$d = 6$  cm und  $N = 2$  zeigen mit größer werdendem  $D/d$  ansteigende  $\dot{m}''_f$  mit einem Maximum bei  $D/d = 0.25$ . Das Verhältnis  $\dot{m}''_{f,\max}/\dot{m}''_{f,\text{eq}} = 1.9$  zeigt eine ungefähre Verdopplung der Massenabbrandrate an. Nach dem Maximum fällt  $\dot{m}''_f(D/d)$  ab, bis sich bei  $D/d = 0.67$  ein konstanter Wert in der Größenordnung von  $\dot{m}''_{\text{mathsff,eq}}$  einstellt. Es zeigt sich, dass das Verhältnis  $\dot{m}''_{f,\max}/\dot{m}''_{f,s} = 2.2$  eines Einzelfeuers mit dem Durchmessers  $d_s$  nur unwesentlich größer als  $\dot{m}''_{f,\max}/\dot{m}''_{f,\text{eq}} = 1.9$  ist. Im Feldversuch mit  $d = 1.5$  m und  $N = 2$  ist ebenfalls ein Maximum zu beobachten, welches bei  $D/d = 0.17$  zu erkennen ist. Die im Vergleich geringe Verschiebung des Maximums in den Feldversuchen ist nicht repräsentativ, da aufgrund der geringen Anzahl an Versuchen, eine genaue Bestimmung der Lage des Maximums, nicht möglich war. Es kann daher von einer relativen Übereinstimmung der Lage der beiden Maxima für  $N = 2$  ausgegangen werden. Die Zunahme der Massenabbrandrate  $\dot{m}''_{f,\max}/\dot{m}''_{f,\text{eq}} = 1.2$  ist niedriger als im Labormaßstab zu beobachten. Eine Begründung hierfür ist die mit zunehmendem Pooldurchmesser steigende optische Dichte und die damit verbundene niedrigere Transmission in der Flamme sowie den mit größerem  $d$  einsetzenden Blockage-Effekt für die thermische Strahlung der benachbarten Poolfeuer. Es ist daher davon auszugehen, dass der Einfluss zusätzlicher Wärmestrahlung auf  $\dot{m}''_f$  mit zunehmendem Pooldurchmesser abnimmt.

Bei einem wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 3$  zeigt sich ebenfalls ein ansteigendes  $\dot{m}''_f$  mit einem Maximum bei  $D/d = 0.25$ . Die maximale Zunahme der Massenabbrandrate ist mit  $\dot{m}''_{f,\max}/\dot{m}''_{f,\text{eq}} = 1.7$  in der gleichen Größenordnung wie bei einem wechselwirkendem Feuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 2$ . Ebenso ist der Unterschied zwischen dem mittleren und den äußeren Pools mit dem Verhältnis  $\dot{m}''_{f,1}/\dot{m}''_{f,2} = 1.1$  der Massenabbrandraten an den Positionen 1 und 2 (s. Abb. 2.26), sehr gering. Es zeigt sich somit, dass für KW-Poolfeuer eine Erhöhung von  $N = 2$  auf  $N = 3$  einen sehr geringen Einfluss auf  $\dot{m}''_f$  hat.

Eine größere Zunahme von  $\dot{m}''_f$  wird für  $N = 5$  und  $N = 9$  beobachtet. Für  $N = 5$  ist eine maximale Zunahme der Massenabbrandrate mit  $\dot{m}''_{f,\max}/\dot{m}''_{f,\text{eq}} = 2.5$  erkennbar. Im Falle von  $N = 9$  beträgt die Zunahme  $\dot{m}''_{f,\max}/\dot{m}''_{f,\text{eq}} = 5.9$ . Es zeigt sich somit eine starke Erhöhung von  $\dot{m}''_f$  mit zunehmenden  $N$ . Ebenso erhöht sich das Verhältnis der Massenabbrandraten des inneren im Vergleich zu den äußeren Pools mit den Verhältnisse,  $\dot{m}''_{f,1}/\dot{m}''_{f,2} = 1.3$  für  $N = 5$  und  $\dot{m}''_{f,1}/\dot{m}''_{f,3} = 1.5$  für  $N = 9$ . Es ist zudem erwähnenswert, dass in einem wechselwirkendem Poolfeuer mit  $N = 9$  die beiden äußeren Positionen  $\dot{m}''_{f,3}/\dot{m}''_{f,2} = 1.1$  in ihrem Abbrandverhalten annähernd gleich sind. Ebenso verschieben sich die Maxima zu größeren  $D/d$ , wobei für  $N = 5$  ein Wert von  $D/d = 0.33$  und für  $N = 9$  ein Wert von  $D/d = 0.5$  erreicht wird. Auffällig ist, dass die Maxima der Massenabbrandraten mit dem kritischen Abständen  $D_{\text{merg}}/d$  der Merging-Bereiche (s. Abs. 5.4.1) zusammenfallen. Es

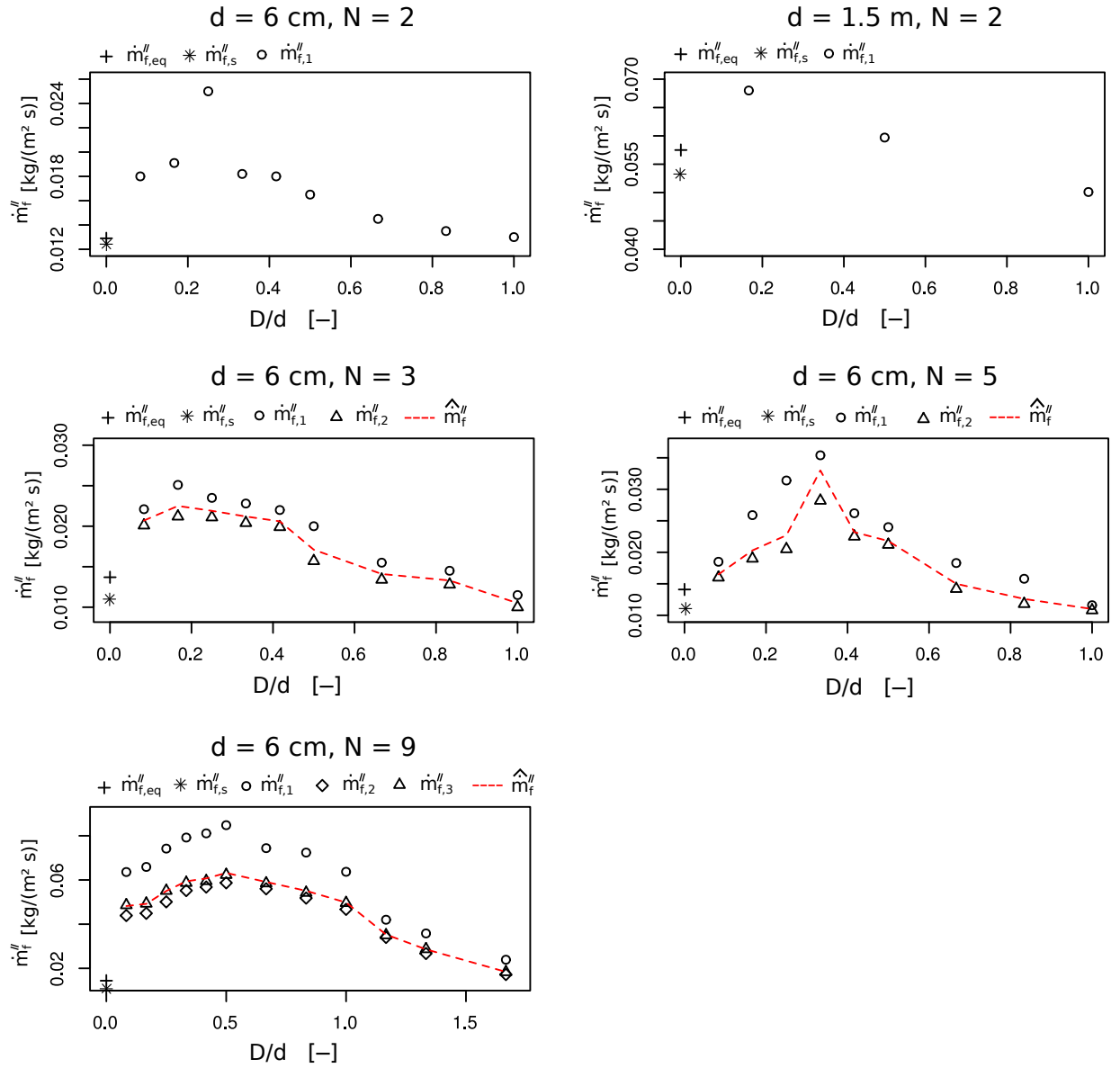


Abb. 5.21: Gemessene zeitlich-gemittelte Massenabbrandraten  $\overline{\dot{m}_f}''$  abhängig von der Anzahl  $N$  der Pools (s. Abb. 2.26)

Tab. 5.6: Flammenbodenhöhen  $H_{Fb}$ , Flammenbodenflächen  $A_{Fb}$  und Einstrahlzahlen  $\varphi_{F,f}$  für Heptan-Poolfeuer  $N = 5$ ,  $d = 6$  cm abhängig vom relativen Abstand  $D/d$

N = 5				
$D/d$ [-]	$r_1$ [cm]	$A_{Fb}$ [cm <sup>2</sup> ]	$\varphi_{F,f}$ [-]	$A_{Fb} \varphi_{F,f}$ [cm <sup>2</sup> ]
0.08	6.5	133	0.029	3.86
0.17	7	154	0.032	4.93
0.25	7.5	177	0.032	5.66
0.33	8	201	0.036	7.24

kommt somit in einem wechselwirkenden Feuer durch die Flammenverschmelzung auch zu einer Verbreiterung des Flammenbodens, insbesondere über dem mittleren Pool. Die Verschiebung der Maxima der Massenabbrandraten zu größeren relativen Abständen  $D/d$  geht daher mit einer Durchmesserergrößerung des Flammenbodens und folglich einer Vergrößerung der Flammenbodenflächen  $A_{Fb}$  einher. Unter Annahme eines Flammenbodendurchmessers von  $d_{Fb} = 2(d + D)$  für  $N = 5$  ergeben sich die in Tab. 5.6 angegebenen Einstrahlzahlen  $\varphi_{F,f}$  nach Gl. 5.18 sowie Flammenbodenflächen  $A_{Fb}$ . Wird nun für  $N = 5$  das Verhältnis  $A_{Fb}(D/d = 0.33) \varphi_{F,f}(D/d = 0.33) / A_{Fb}(D/d = 0.08) \varphi_{F,f}(D/d = 0.08) = 1.9$  mit den Verhältnissen der Massenabbrandraten  $\dot{m}_{f,1}''(D/d = 0.33) / \dot{m}_{f,1}''(D/d = 0.08) = 1.9$  verglichen, zeigt sich, dass die Massenabbrandraten als Funktion von  $D/d$  im Merging-Bereich stark durch die Flammgeometrie bestimmt werden. Eine weitere Vergrößerung von  $D/d$  in den Übergangs-Bereich bewirkt, dass der Durchmesser des Flammenbodens mit zunehmendem  $D/d$  abnimmt. Hierdurch ist auch die Abnahme von  $\dot{m}_f''$  im Übergangs-Bereich zu erklären. Im Getrennten-Bereich stellen sich mit zunehmendem  $D/d$  Verhältnisse ein, die einem Einzelfeuer ähnlich sind. Außerdem sind die hohen Werte der Massenabbrandrate durch den hohen Anteil der Wärmestrahlung am gesamten Wärmerückstrom zu erklären. Da der Wärmestrom  $\dot{Q}_{ba,rad}$  sehr viel größer als die Wärmeströme  $\dot{Q}_{ba,\lambda}$  und  $\dot{Q}_{ba,\alpha}$  ist, kann die Zunahme von  $\dot{m}_f''$  also alleine durch die Vergrößerung des Flammenbodendurchmessers und die gestiegenen Flammentemperaturen erklärt werden.

In der Literatur wurden die Massenabbrandraten als tatsächliche Masseverluste während der stationären Brenndauer bislang nicht bestimmt. Es werden in [6, 93, 94] nur Daten über die gesamten Brenndauern  $t_{bt}$  wechselwirken-

der n-Heptan-Feuer mit  $N = 9$  gezeigt. Während das Abbrandverhalten der äußeren Positionen  $t_{bt,3}/t_{bt,2} = 1.4$  im Bezug zur äußeren Position  $\dot{m}_{f,3}''/\dot{m}_{f,2}'' = 1.1$  relativ genau wiedergegeben wird, kommt es bei den maximalen Werten  $t_{bt,max}/t_{bt,eq} = 2.3$  und  $\dot{m}_{f,max}''/\dot{m}_{f,eq}'' = 5.9$  zu einer deutlichen Unterschätzung. Grund hierfür ist das Heranziehen von gesamten Brenndauern. Die Massenabnahme während eines Abbrandes ist, mit Ausnahme der stationären Brenndauer, nicht linear. Eine Bestimmung der gesamten Brenndauer, obwohl experimentell einfach durchführbar, führt zu einer Mittelung des Massenverlustes. Während ein Abbrand zu Beginn und am Ende durch ein langes Zeitintervall mit relativ geringem Massenverlust geprägt ist, wird durch die Nutzung einer gesamten Brenndauer, ein gleichmäßig hoher mittlerer Massenverlust postuliert. Der eigentliche Massenverlust während der stationären Brenndauer wird daher zu niedrig erfasst, so dass keine Übereinstimmung der Literaturergebnisse mit den hier vorgestellten Ergebnissen vorliegen kann.

#### 5.4.8 Massenabbrandraten von DTBP-Poolfeuern

Die Massenabbrandraten  $\dot{m}_f''$  wechselwirkender DTBP-Poolfeuer können der Abb. 5.22 entnommen werden, wobei der geometrische Aufbau der Versuche in Abb. 2.26 erklärt ist. Bei einem Abstand von  $D/d = 0$  ist jeweils ein Referenzfeuer mit einem Radius  $d_{eq}$  entsprechend der gleichen Brennstoffoberfläche wie das wechselwirkende Feuer aufgetragen. Für ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer  $d = 6$  cm,  $N = 2$  steigen die Massenabbrandraten  $\dot{m}_f''$  mit zunehmendem relativen Abstand  $D/d$  zwischen den Pools an, wobei ein Maximum bei  $D/d = 0.5$  beobachtet wird. Das Maximum ist im Vergleich zu einem Heptan-Poolfeuer zu größeren relativen Abständen verschoben. Diese Verschiebung ist durch den breiteren Merging-Bereich und die dadurch entstehenden größeren Querschnittsflächen des Flammenbodens zu erklären ist.

Das Verhältnis der Massenabbrandrate ist im Falle des DTBPs  $\dot{m}_{f,max}''/\dot{m}_{f,eq}'' = 1.12$  und somit deutlich geringer, als das der Heptan-Flamme. Durch die relative Unabhängigkeit der Massenabbrandraten vom Pooldurchmesser ändert sich das Verhältnis  $\dot{m}_{f,max}''/\dot{m}_{f,s}'' = 1.12$  nicht. Die Feldversuche mit  $N = 2$  und  $d = 1.5$  m zeigen bei  $D/d = 0.2$  ein Verhältnis der Massenabbrandrate von  $\dot{m}_{f,max}''/\dot{m}_{f,s}'' = 1.06$ . Eine Begründung hierfür ist die mit zunehmendem Pooldurchmesser steigende optische Dichte und die damit verbundene niedrigere Transmission in der Flamme sowie den mit größerem  $d$  einsetzenden Blockage-Effekt für die thermische Strahlung der benachbarten Poolfeuer. Es ist daher davon auszugehen, dass der Einfluss zusätzlicher Wärmestrahlung auf  $\dot{m}_f''$  mit zunehmendem Pooldurchmesser abnimmt.

Bei einem wechselwirkenden Poolfeuer mit  $N = 3$  und  $d = 6$  cm wird eine

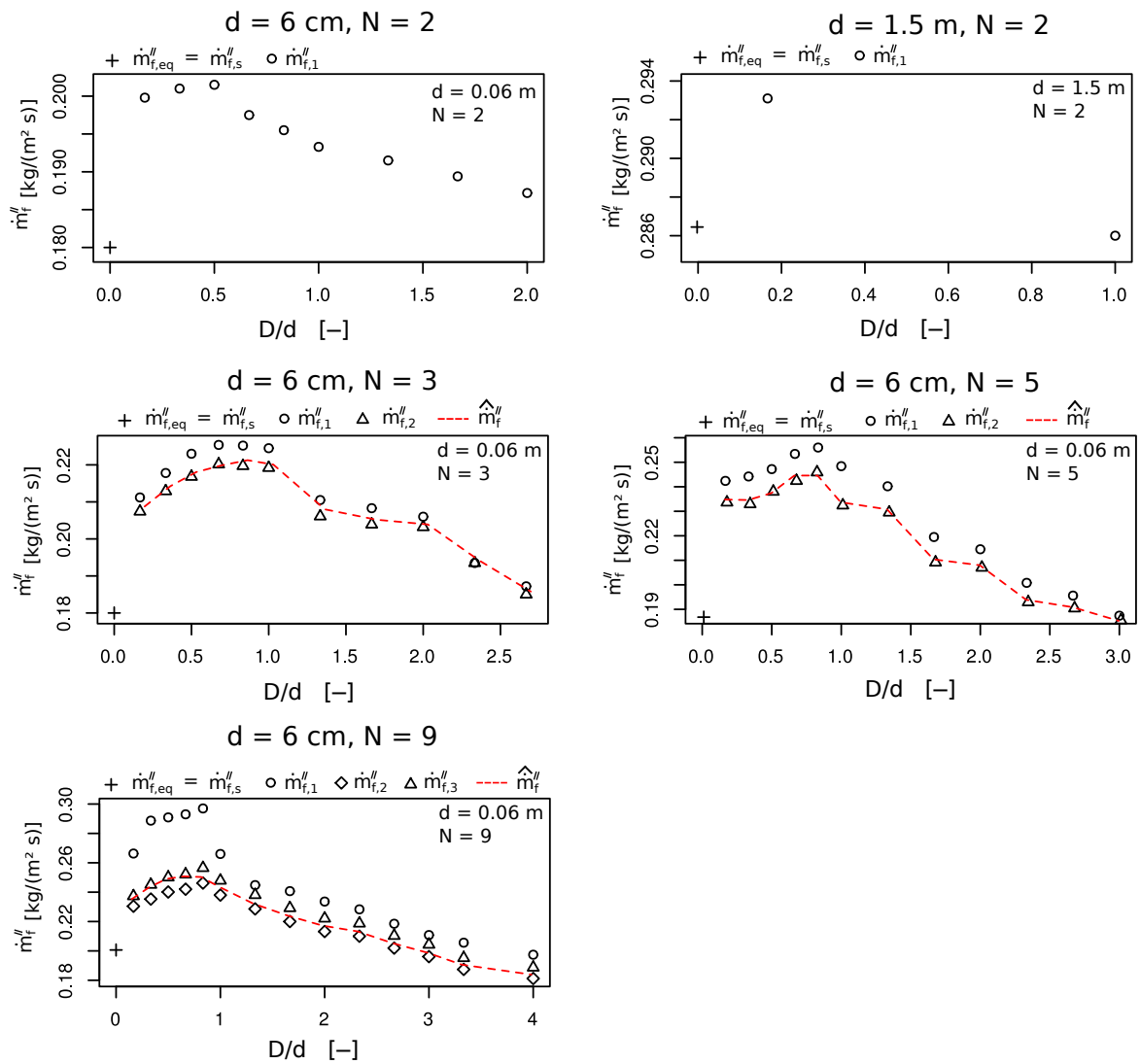


Abb. 5.22: Gemessene zeitlich-gemittelte Massenabbrandraten  $\overline{\dot{m}_f}''$  wechselwirkender DTBP-Poolfeuer (s. Abb. 2.26)

Verschiebung des Maximums der Massenabbrandrate zu  $D/d = 0.67$  beobachtet. Bei einem DTBP-Poolfeuer ist bereits bei  $N = 3$ , im Unterschied zu Heptan-Poolfeuern, eine Zunahme des Verhältnisses der Massenabbrandrate  $\dot{m}_{f,\max}''/\dot{m}_{f,\text{eq}}'' = 1.25$  zu erkennen. Der Unterschied von  $\dot{m}_f''$  zwischen dem inneren und den äußeren Pools ist mit  $\dot{m}_{f,1}''/\dot{m}_{f,2}'' = 1.03$  sehr gering, ähnlich wie bei wechselwirkenden Heptan-Flammen.

Für wechselwirkende DTBP-Poolfeuer mit  $N = 5$  und  $N = 9$  wird das jeweilige Maximum der Massenabbrandrate bei  $D/d = 0.83$  beobachtet. Die Verhältnisse der Massenabbrandraten von DTBP-Poolfeuern mit  $\dot{m}_{f,\max}''/\dot{m}_{f,\text{eq}}'' = 1.35$  für  $N = 5$  und  $\dot{m}_{f,\max}''/\dot{m}_{f,\text{eq}}'' = 1.56$  für  $N = 9$  sind beide niedriger im Vergleich zu Heptan-Poolfeuern. Ebenso erhöht sich das Verhältnis der Massenabbrandraten des inneren im Vergleich zu den äußeren Pools. Dabei unterscheiden sich die Verhältnisse im Merging-Bereich mit  $\dot{m}_{f,1}''(D/d = 0.83)/\dot{m}_{f,2}''(D/d = 0.83) = 1.04$  ( $N = 5$ ) und  $\dot{m}_{f,1}''(D/d = 0.83)/\dot{m}_{f,2}''(D/d = 0.83) = 1.2$  ( $N = 9$ ), von denen im Übergangs- und im Getrennten-Bereich  $\dot{m}_{f,1}''/\dot{m}_{f,2}''(D/d = 2.67) = 1.5$  ( $N = 5$ ) und  $\dot{m}_{f,1}''/\dot{m}_{f,2}''(D/d = 2.67) = 1.01$  ( $N = 9$ ). Es ist zudem erwähnenswert, dass in einem Poolfeuer mit  $N = 9$  die beiden äußeren Positionen mit  $\dot{m}_{f,3}''/\dot{m}_{f,2}'' = 1.1$  in ihrem Abbrandverhalten nahezu gleich sind. Wie bei den Heptan-Poolfeuern beschrieben, kommt es auch bei wechselwirkenden DTBP-Poolfeuern zu einer Verbreiterung des Flammenbodens, insbesondere über dem mittleren Pool. Die Verschiebung des Maximums der Massenabbrandraten zu größeren  $D/d$  führt auch hier zu einer Vergrößerung des Durchmessers des Flammenbodens infolge der Flammenverschmelzung sowie einer entsprechenden Vergrößerung der Flammenbodenflächen  $A_{\text{Fb}}$ . Folglich sind die Maxima der Massenabbrandraten von DTBP-Poolfeuer aufgrund des größeren Merging-Bereiches zu größeren  $D/d$  verschoben. Unter Annahme von  $d_{\text{Fb}} = 2(d + D)$  für  $N = 5$  ergeben sich die in Tab. 5.7 angegebenen Einstrahlzahlen  $\varphi_{\text{F},f}$  nach Gl. 5.18 sowie die Flammenbodenflächen  $A_{\text{Fb}}$ . Da bei DTBP-Poolfeuern  $\frac{\dot{Q}_{\text{ba,rad}}}{\dot{Q}_{\text{ba,tot}}} = 1 - \frac{\dot{Q}_{\text{d}}}{\dot{Q}_{\text{ba,tot}}}$  gilt, muss bei einer vertieften Betrachtung ein geringere Anteil der Wärmestrahlung am gesamten Wärmerückstrom herangezogen werden. Wird für  $N = 5$  das Verhältnis  $\dot{m}_{f,1}''(D/d = 0.83)/\dot{m}_{f,1}''(D/d = 0.08) = 1.06$  mit dem Verhältnis

$\frac{\dot{Q}_{\text{ba,rad}}}{\dot{Q}_{\text{ba,tot}}} \frac{A_{\text{Fb}}(D/d=0.83) \varphi_{\text{F},f}(D/d=0.83)}{A_{\text{Fb}}(D/d=0.08) \varphi_{\text{F},f}(D/d=0.08)} = 1.11$  verglichen, zeigt sich, dass der Verlauf der Massenabbrandraten als Funktion von  $D/d$  im Merging-Bereich stark durch die Flammengeometrie bestimmt ist. Eine weitere Vergrößerung von  $D/d$  in den Übergangs-Bereich bewirkt, dass der Durchmesser des Flammenbodens mit zunehmendem  $D/d$  abnimmt. Auch die Zunahme der Massenabbrandraten von wechselwirkenden Peroxid-Poolfeuern kann mit der Zunahme von  $\dot{Q}_{\text{ba,rad}}$  durch eine Vergrößerung von  $d_{\text{Fb}}$  begründet werden. Der Anstieg der Kurve  $\dot{m}_f''(D/d)$  bis zu ihrem Maximum ist bei DTBP-Poolfeuern im Vergleich zu

Tab. 5.7: Flammenbodenhöhen  $H_{Fb}$ , Flammenbodenflächen  $A_{Fb}$  und Einstrahlzahlen  $\varphi_{F,f}$  für DTBP-Poolfeuer  $N = 5$ ,  $d = 6$  cm

$N = 5$				
$D/d$ [-]	$r_1$ [cm]	$A_{Fb}$ [cm <sup>2</sup> ]	$\varphi_{F,f}$ [-]	$A_{Fb} \varphi_{F,f}$ [cm <sup>2</sup> ]
0.17	7	154	0.0122	1.9
0.33	8	201	0.0127	2.6
0.5	9	254	0.0128	3.3
0.67	10	314	0.0135	4.2
0.83	11	380	0.0136	5.2

Heptan-Poolfeuern deutlich flacher. Dies kann begründet werden mit dem geringeren Anteil des Strahlungswärmerückstroms am gesamten Wärmerückstrom. Zudem ist die Flammenbodenfläche bereits bei einem einzelnen DTBP-Poolfeuer gegenüber einer Heptan-Flamme verbreitert, so dass die Verbreiterung durch die Flammenverschmelzung einen geringeren Einfluss hat.

### Fehlerrechnung bei der Ermittlung der Massenabbrandraten

Eine Abschätzung des Fehlers der gemessenen Massenabbrandraten soll anhand wechselwirkender DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 2$  erfolgen. Über alle gemessenen  $D/d$  ergibt sich ein absoluter Fehler von  $\Delta \dot{m}_f'' = 1.78 \text{ s} = 0.0055 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$  bei einer statistischen Sicherheit von  $\alpha = 0.9$ . Der angemessen kleine relative Fehler beträgt  $(\Delta \dot{m}_f'' / \dot{m}_f'')_{av} = 0.013$ .

## 5.5 Flammenlängen von wechselwirkenden Poolfeuern

### 5.5.1 Flammenlängen von KW-Poolfeuern

Für die Sicherheitstechnik ist die Zunahme der Flammenlänge eines wechselwirkenden Feuers in einer Matrixanordnung (s. Abb. 2.26), im Vergleich zu einem Feuer ohne Wechselwirkung, interessant. Die vergleichenden Literaturstellen werden im Kap.2.15 behandelt. Die Flammenlängen wechselwirkender KW-Poolfeuer, relativ zum Durchmesser  $d = d_s$  eines einzelnen Feuers aus der Matrixanordnung, sind in Abb. 5.23 dargestellt. Beispielsweise ergibt sich bei

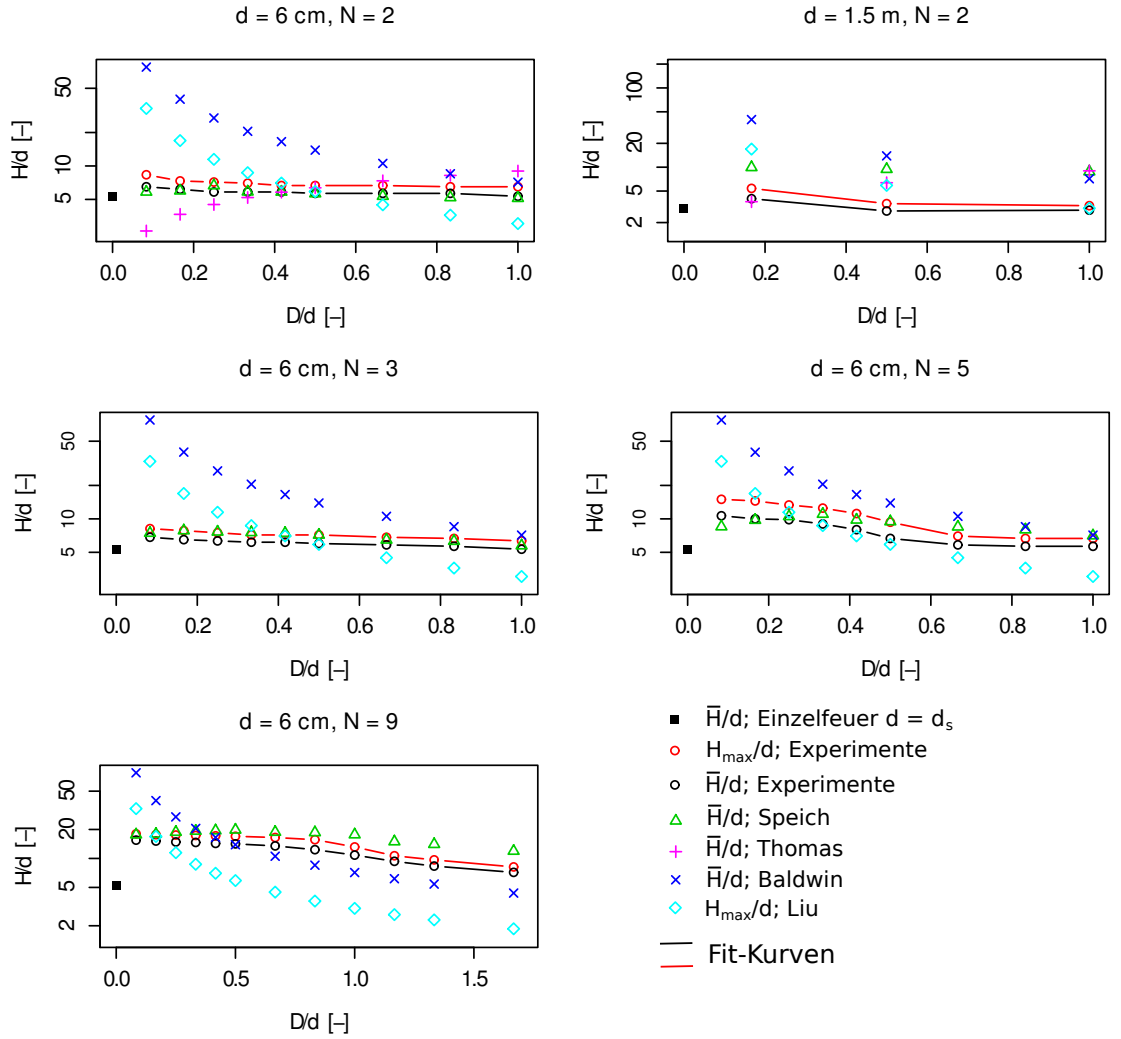


Abb. 5.23: Experimentelle und korrelierte relative Flammenlängen  $\bar{H}/d_s$  und  $H_{\max}/d_s$  als Funktion des relativen Abstandes  $D/d$  für KW-Poolfeuer, vergleichend mit der Literatur aus Kap.2.15, dargestellt.

$d = 6 \text{ cm}$  und  $N = 2$  für kleine  $D/d$  eine Zunahme der relativen zeitlich-gemittelten Flammenlängen um den Faktor  $\frac{H/d(D/d=0.08)}{H/d_s} = 1.23$ . Die relativen Flammenlängen nehmen mit zunehmendem  $D/d$  stetig ab und erreichen den Wert eines Einzelfeuers mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1$ . Die Korrelation von Baldwin überschätzt die relativen  $\bar{H}/d$  bei kleinen  $D/d$  bis zu einem Faktor 12, bei großen  $D/d$  hingegen wird eine bessere Abschätzung erhalten, die allerdings noch um den Faktor 1.3 größer ist als die experimentellen  $\bar{H}/d$ . Insgesamt ist die Abweichung der Baldwin-Korrelation von den experimentellen  $\bar{H}/d$  mit einem  $\text{NMFQ} = 0.27$  und  $\text{AF} = -$



Tab. 5.8: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein KW-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 2$ ,  $0.083 \leq D/d \leq 1$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich	
NMFQ [-]	$4.04 \cdot 10^{-5}$	$8.97 \cdot 10^{-5}$	$5.2 \cdot 10^{-4}$	
AF [-]	$-1.56 \cdot 10^{-5}$	$-1.32 \cdot 10^{-5}$	$2.3 \cdot 10^{-3}$	
	Thomas	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.022	0.27	0.053	0.39
AF [-]	$6.0 \cdot 10^{-3}$	-0.11	-0.14	0.13

0.11 (nach Tab. 5.8) relativ groß. Die von Thomas für  $N = 2$  analytisch entwickelte Korrelation unterschätzt die relativen  $\bar{H}/d$  bei kleinen  $D/d$  um den Faktor 2.5, wohingegen die relativen Flammenlängen für große  $D/d$  um den Faktor 1.5 überschätzt werden. Die Thomas-Korrelation ist mit einem  $\text{NMFQ} = 0.022$  und  $\text{AF} = 6.0 \cdot 10^{-3}$  (nach Tab. 5.8) zur Beschreibung von  $\bar{H}/d$  besser geeignet, als die Baldwin-Korrelation. Für die Flammenlängen  $\bar{H}/d$  bietet die Speich-Korrelation die genaueste Beschreibung. Sowohl für kleine  $D/d$  mit  $\frac{H/d_s}{H/d(D/d=0.083), \text{Speich}} = 1.1$ , als auch für große  $D/d$  mit  $\frac{H/d_s}{H/d(D/d=1), \text{Speich}} = 1.0$  wird eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen erzielt, die durch ein  $\text{NMFQ} = 5.2 \cdot 10^{-4}$  und  $\text{AF} = 2.3 \cdot 10^{-3}$  (nach Tab. 5.8) bestätigt wird.

Die maximalen relativen Flammenlängen  $H_{\max}/d$ , werden von der Liu-Korrelation für kleine  $D/d$  um den Faktor 4 überschätzt, während sie für große  $D/d$  um den Faktor 2.1 unterschätzt werden, wodurch ein  $\text{NMFQ} = 0.053$  und  $\text{AF} = -0.14$  (nach Tab. 5.8) erzielt wird.

Für ein wechselwirkendes KW-Poolfeuer mit  $N = 2$  und  $d = 1.5$  m kommt es für kleine relative Abstände  $D/d$  zu einer maximalen Zunahme von  $\bar{H}/d$  um den Faktor 1.13, der somit kleiner ist, als im Labormaßstab mit gleicher Konfiguration. Für große  $D/d$  fällt  $\bar{H}/d$  auf die Flammenlänge eines Einzelfeuers mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1$ . Die Baldwin-Korrelation überschätzt  $\bar{H}/d$  auch für größere Pooldurchmesser bei kleinen  $D/d$  um den Faktor 6.6, wobei auch bei großen  $D/d$  die Flammenlängen  $\bar{H}/d$  um den Faktor 1.7 überschätzt werden. Insgesamt ist die Abweichung der Baldwin-Korrelation von den experimentellen Werten mit einem  $\text{NMFQ} = 1.42$  und  $\text{AF} = -0.28$  (nach Tab. 5.9) auch für große Pooldurchmesser relativ groß. Die Thomas-Korrelation unterschätzt  $\bar{H}/d$  für

Tab. 5.9: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein KW-Poolfeuer mit  $d = 1.5$  m,  $N = 2$ ,  $0.16 \leq D/d \leq 1$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich	
NMFQ [-]	$8.81 \cdot 10^{-3}$	0.010	0.05	
AF [-]	-0.022	-0.022	-0.086	
	Thomas	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.30	1.42	0.33	0.39
AF [-]	0.093	-0.28	-0.083	0.13

kleine  $D/d$  um den Faktor 1.6 und überschätzt  $\bar{H}/d$  für große  $D/d$  um den Faktor 2.1. Die Genauigkeit der Vorhersage bleibt über die hier untersuchten Pooldurchmesser relativ gleich, wobei die Vorhersage der Thomas-Korrelation mit einem NMFQ = 0.30 und AF = 0.093 (nach Tab. 5.9) etwas genauer ist als die Vorhersage der Baldwin-Korrelation. Die beste Vorhersage mit einem NMFQ = 0.05 und AF = -0.086 (nach Tab. 5.9) liefert die Speich-Korrelation, welche über den gesamten untersuchten Bereich von  $D/d$  die experimentellen  $\bar{H}/d$  noch um den Faktor  $\approx 1.85$  überschätzt.

Die Liu-Korrelation überschätzt, wie auch schon für kleine Durchmesser beobachtet,  $H_{\max}/d$  für kleine  $D/d$  um den Faktor 2.8 und unterschätzt  $H_{\max}/d$  für große  $D/d$  um den Faktor 1.43. Die Vorhersage der Liu-Korrelation ist für große Pooldurchmesser mit NMFQ = 0.33 und AF = -0.083 (nach Tab. 5.9) etwas genauer, im Vergleich zu kleineren Pooldurchmessern.

Für ein wechselwirkendes KW-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 3$  liegt für kleine  $D/d$  die Zunahme von  $\bar{H}/d$  bei einem Faktor von 1.3 und steigert sich für  $d = 6$  cm und  $N = 5$  auf den Faktor 2 sowie für  $d = 6$  cm und  $N = 9$  auf den Faktor 2.9. Für große  $D/d$  fallen die  $\bar{H}/d$ , mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1$  für  $N = 3$ , mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1.1$  für  $N = 5$  und mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1.3$  für  $N = 9$  auf die Flammenlänge eines einzelnen Poolfeuers mit  $d = d_s$  ab. Die Genauigkeit der Baldwin-Korrelation nimmt mit zunehmender Anzahl  $N$  zu, wobei die  $\bar{H}/d$  um den Faktor 11.4 für  $N = 3$ , um den Faktor 7.2 für  $N = 5$  und Faktor 5.0 für  $N = 9$  überschätzt werden. Für große  $D/d$  werden die  $\bar{H}/d$  im Falle von  $N = 3$  um den Faktor 1.3 überschätzt, welches zu einem NMFQ = 0.14 und AF = -0.095 (nach Tab. 5.10) führt. Auch für  $N = 5$  werden die Flammenlängen für große

Tab. 5.10: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein KW-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 3$ ,  $0.083 \leq D/d \leq 1$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$5.18 \cdot 10^{-4}$	$5.28 \cdot 10^{-3}$	$3.9 \cdot 10^{-3}$
AF [-]	$1.08 \cdot 10^{-4}$	$-6.37 \cdot 10^{-5}$	$9.9 \cdot 10^{-3}$
	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.14	0.09	0.053
AF [-]	-0.095	0.045	$7.6 \cdot 10^{-3}$

Tab. 5.11: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein KW-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $0.083 \leq D/d \leq 1$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$6.66 \cdot 10^{-4}$	$7.18 \cdot 10^{-4}$	$7.1 \cdot 10^{-3}$
AF [-]	$3.49 \cdot 10^{-3}$	$5.12 \cdot 10^{-4}$	-0.018
	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.14	0.031	$2.00 \cdot 10^{-3}$
AF [-]	-0.091	0.028	-0.018

$D/d$  ebenfalls um den Faktor 1.3 überschätzt, so dass sich ein  $\text{NMFQ} = 0.14$  und  $\text{AF} = -0.091$  (nach Tab. 5.11) ergibt. Im Falle von  $N = 9$  werden für große  $D/d$  die Flammenlängen um den Faktor 1.4 unterschätzt, so dass sich hier ein  $\text{NMFQ} = 0.048$  und  $\text{AF} = -6.4 \cdot 10^{-3}$  (nach Tab. 5.12) ergibt. Die Baldwin-Korrelation liefert somit für eine größere Anzahl an wechselwirkenden Feuern eine genauere Vorhersage. In die Baldwin-Korrelation gehen aber entscheidende Parameter, wie die Massenabbrandrate, Brennstoffoberfläche und die Dichte des Brennstoffdampfes nicht ein, wodurch die bessere Übereinstimmung der Vorhersagen für größere  $N$  nicht auf einer Betrachtung der physikalischen Vorgänge basiert. Die Speich-Korrelation liefert über den gesamten untersuchten Bereich der relativen Abstände eine Überschätzung von  $\bar{H}/d$  um den Faktor  $\approx 1.1$ , sowohl für  $N = 3$ ,  $N = 5$  und  $N = 9$ . Diese gute Übereinstimmung spiegelt sich

Tab. 5.12: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein KW-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 9$ ,  $0.083 \leq D/d \leq 1.67$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$2.83 \cdot 10^{-4}$	$6.26 \cdot 10^{-4}$	0.011
AF [-]	$5.05 \cdot 10^{-4}$	$8.18 \cdot 10^{-4}$	-0.029
	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.048	0.12	0.011
AF [-]	$-6.4 \cdot 10^{-3}$	0.067	-0.029

auch in den NMFQ- und AF-Werten (s. Tab. 5.10 - 5.12) wieder. Die relativ gute Übereinstimmung der Speich-Korrelation mit den experimentellen Werten wird dadurch erreicht, dass die für die Flammenlängen wichtigen Parameter, wie die Massenabbrandrate und die Dichte des Brennstoffdampfes, berücksichtigt werden. Eine Betrachtung der Brennstoffoberfläche fehlt allerdings, wodurch eine noch bessere Vorhersage möglich sein sollte.

Die Liu-Korrelation überschätzt die  $H_{\max}/d$  für kleine  $D/d$  um den Faktor 4 für  $N = 3$ , den Faktor 2.2 für  $N = 5$  und den Faktor 1.8 für  $N = 9$ . Für große  $D/d$  werden die  $H_{\max}/d$  um den Faktor 2.1 für  $N = 3$ , den Faktor 2.3 für  $N = 5$  und den Faktor 4.4 für  $N = 9$  unterschätzt. Die Liu-Korrelation gibt den Verlauf von  $H_{\max}/d$  über den gesamten  $D/d$ -Bereich ungenau wieder. Das spiegelt sich auch in den  $\text{NMFQ} = 0.09$  und  $\text{AF} = 0.045$  (nach Tab. 5.10) für  $N = 3$ ,  $\text{NMFQ} = 0.031$  und  $\text{AF} = 0.028$  (nach Tab. 5.11) für  $N = 5$  und  $\text{NMFQ} = 0.12$  und  $\text{AF} = 0.067$  (nach Tab. 5.12) für  $N = 9$  wieder. Der Grund für die große Abweichung ist die unklare Definition der maximalen Flammenlänge. Es ist davon auszugehen, dass die Liu-Korrelation aus dem Vergleich momentaner Flammenlängen stammt und nicht mit dem Intermittenzkriterium ermittelt wurde.

In einer sicherheitstechnischen Betrachtung ist aber auch anstelle des Bezugs auf  $d = d_s$  ein Bezug auf einen äquivalenten Radius  $d = d_{\text{eq}}$  notwendig. Oftmals ist ein vorher festgelegtes Volumen zu lagern, so dass auch eine mehr systematische Verteilung des Gefahrgutes in einem Lager relevant sein kann. Die Flammenlängen wechselwirkender KW-Poolfeuer relativ zum äquivalenten Durchmesser  $d = d_{\text{eq}}$  sind in Abb. 5.24 dargestellt. Die Kamigawa-Korrelation ist für Brennerflammen mit  $Q^* > 0.03$  (nach Gl. 2.82) definiert. Die bei KW-Poolfeuern und bei DTBP-Poolfeuern vorliegenden  $Q^*$  sind zu meist deutlich

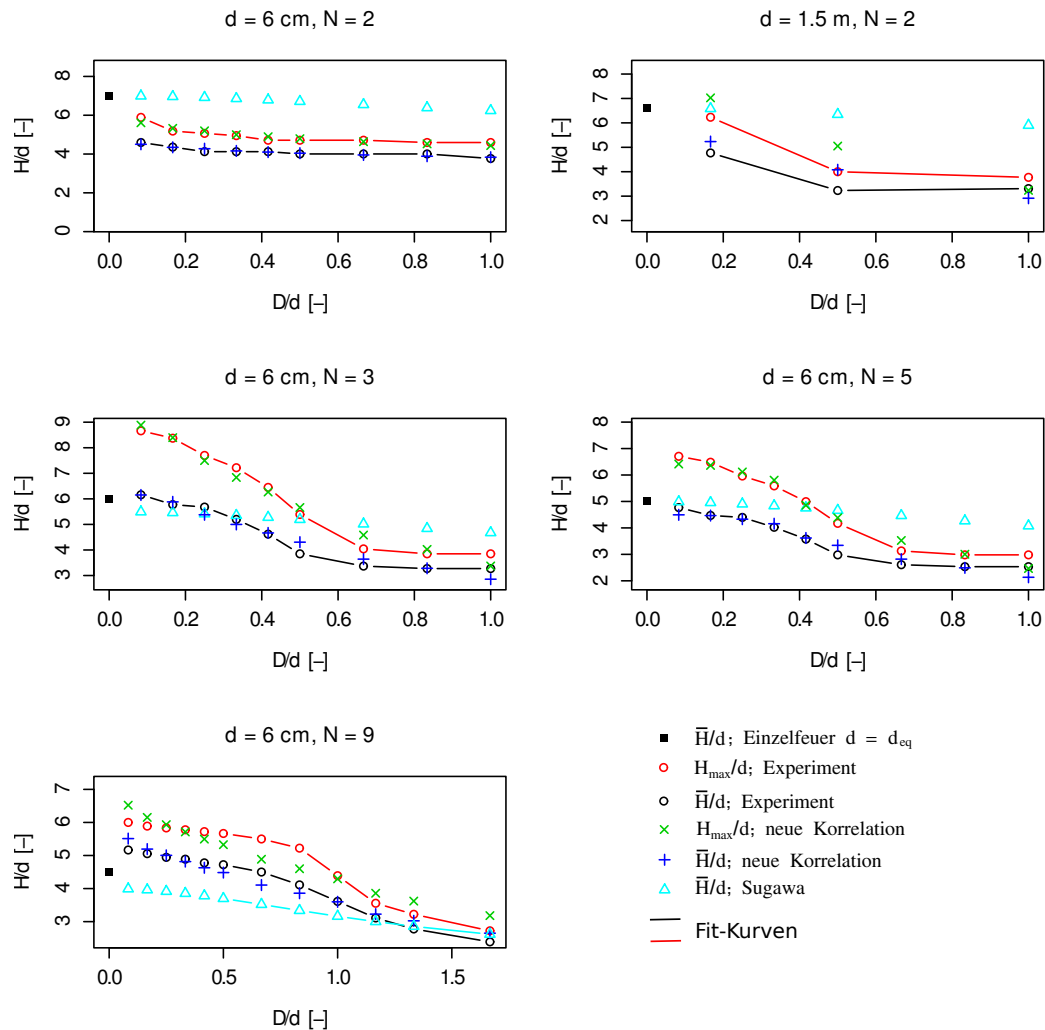


Abb. 5.24: Experimentelle und korrelierte  $\bar{H}/d_{eq}$  und  $H_{max}/d_{eq}$  als Funktion des relativen Abstandes  $D/d$  für KW-Poolfeuer, vergleichend mit der Literatur aus Kap.2.15, dargestellt.

$\gg 0.03$ . Daher ist eine Anwendung der Kamigawa-Korrelation auf Poolfeuer mit den bisherigen Koeffizienten nicht möglich. Andererseits bildet der Parameter  $Q^*$  eine sehr gute Basis zur Beschreibung von Flammenlängen, da  $Q^*$  fundamentale Parameter, wie die totale Wärmefreisetzungsrate, einbezieht sowie eine genaue Beschreibung der Geometrie des wechselwirkenden Feuers erfolgt. Daher wird auf Basis von  $Q^*$  eine neue Korrelation der Flammenlängen bezogen auf den äquivalenten Durchmesser  $d = d_{eq}$ , durchgeführt. Für wechselwirkende KW-

Poolfeuer ergeben sich dabei für die zeitlich-gemittelten Flammenlängen  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$  die folgenden neuen Korrelationen:

$$\bar{H}/d_{\text{eq}} = \begin{cases} 6.76 Q^{*,0.71} & \text{für } N = 2 \\ 25.74 Q^{*,0.27} & \text{für } N = 3 \\ 19.71 Q^{*,0.25} & \text{für } N = 5 \\ 12.28 Q^{*,0.16} & \text{für } N = 9 \end{cases} \quad (5.51)$$

Für die maximalen Flammenlängen  $H_{\text{max}}/d_{\text{eq}}$  wechselwirkender KW-Poolfeuer sind die folgenden neuen Korrelationen gültig:

$$H_{\text{max}}/d_{\text{eq}} = \begin{cases} 9.86 Q^{*,0.94} & \text{für } N = 2 \\ 54.12 Q^{*,0.35} & \text{für } N = 3 \\ 42.81 Q^{*,0.25} & \text{für } N = 5 \\ 14.30 Q^{*,0.15} & \text{für } N = 9 \end{cases} \quad (5.52)$$

Beispielsweise resultiert für  $d = 6$  cm und  $N = 2$  (s. Abb. 5.24) bei kleinen  $D/d$  ein Verhältnis von  $\frac{\bar{H}/d_{\text{eq}}(D/d=0.083)}{\bar{H}/d_{\text{eq}}} = 0.7$ . Die relative Flammenlänge nimmt mit zunehmendem  $D/d$  stetig ab und erreicht den Wert  $\frac{H/d(D/d=1)}{\bar{H}/d_{\text{eq}}} = 0.5$ . Die verringerte Flammenlänge kann dadurch erklärt werden, dass sich die beiden Flammen im Raum zwischen den Pools vereinen und sich die Flammenlänge somit um den Faktor  $\sin(\Theta)$  erniedrigt. Die Korrelation von Sugawa überschätzt die  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$  bei kleinen  $D/d$  um den Faktor 1.6, bei großen  $D/d$  hingegen wird eine bessere Abschätzung erzielt, wobei die korrelierten  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$  um den Faktor 1.4 größer sind als die experimentellen  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$ . Insgesamt ist die Abweichung der Sugawa-Korrelation von den experimentellen  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$  mit einem NMFQ = 0.39 und AF = 0.13 (nach Tab. 5.8) relativ groß. Wesentlich bessere Abschätzungen der mittleren relativen Flammenlängen mit einem NMFQ =  $4.04 \cdot 10^{-5}$  und AF =  $-1.56 \cdot 10^{-5}$  (nach Tab. 5.8) sowie auch der maximalen Flammenlängen mit einem NMFQ =  $8.97 \cdot 10^{-5}$  und AF =  $-1.32 \cdot 10^{-5}$  liefern die neuen Korrelationen.

Für ein wechselwirkendes KW-Poolfeuer mit  $N = 2$  und  $d = 1.5$  m kommt es für kleine  $D/d$  zu einem Verhältnis von  $\frac{\bar{H}/d_{\text{eq}}(D/d=0.083)}{\bar{H}/d_{\text{eq}}} = 0.7$ . Das Verhältnis ist in etwaiger Übereinstimmung mit dem Labormaßstab gleicher Konfiguration. Für große  $D/d$  fällt  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$  auf  $\frac{H/d(D/d=1)}{\bar{H}/d_{\text{eq}}} = 0.49$  ab. Die Sugawa-Korrelation überschätzt die  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$  auch für größere Pooldurchmesser bei kleineren  $D/d$  um den Faktor 1.4, wobei auch bei größeren  $D/d$  die  $\bar{H}/d_{\text{eq}}$  um den Faktor 1.8 überschätzt werden. Insgesamt ist die Abweichung der Sugawa-Korrelation von den experimentellen Werten mit einem NMFQ = 0.33 und AF = -0.083

(nach Tab. 5.9) auch für große Pooldurchmesser relativ groß. Wesentlich bessere Abschätzungen der  $\bar{H}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 8.81 \cdot 10^{-3}$  und  $AF = -0.022$  sowie auch der  $H_{max}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 0.010$  und  $AF = -0.022$  liefern die neuen Korrelationen.

Für ein wechselwirkendes KW-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 3$  ergeben sich für kleine  $D/d$  die Verhältnisse  $\frac{H/d(D/d=0.083)}{H/d_{eq}} = 1$ , für  $d = 6$  cm und  $N = 5$  von  $\frac{H/d(D/d=0.083)}{H/d_{eq}} = 0.95$  sowie für  $d = 6$  cm und  $N = 9$  von  $\frac{H/d(D/d=0.083)}{H/d_{eq}} = 1.14$ . Für große  $D/d$  nehmen die Verhältnisse mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_{eq}} = 0.55$  für  $N = 3$ , mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_{eq}} = 0.51$  für  $N = 5$  und mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_{eq}} = 0.53$  für  $N = 9$  ab.

Die Sugawa-Korrelation gibt die  $\bar{H}/d_{eq}$  für kleine  $D/d$  bei  $N = 3$  mit dem Faktor 1.0 und für  $N = 5$  mit dem Faktor 1.0 relativ genau wieder. Bei  $N = 9$  unterschätzt die Sugawa-Korrelation die  $\bar{H}/d_{eq}$  um den Faktor 1.3. Für große  $D/d$  werden die  $\bar{H}/d_{eq}$  im Falle von  $N = 3$  um den Faktor 1.5 überschätzt, welches zu einem  $NMFQ = 0.053$  und  $AF = 7.6 \cdot 10^{-3}$  (nach Tab. 5.10) führt. Für  $N = 5$  werden die Flammenlängen für große  $D/d$  ebenfalls um den Faktor 1.61 unterschätzt, welches zu einem  $NMFQ = 2.00 \cdot 10^{-3}$  und  $AF = -0.018$  (nach Tab. 5.11) liefert. Im Falle von  $N = 9$  werden für große  $D/d$  die Flammenlängen um den Faktor 1.10 unterschätzt, welches einem  $NMFQ = 0.011$  und  $AF = -0.029$  (nach Tab. 5.12) entspricht.

Wesentlich bessere Abschätzungen der  $\bar{H}/d_{eq}$  für  $N = 3$  mit einem  $NMFQ = 5.18 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 1.08 \cdot 10^{-4}$  sowie auch der  $H_{max}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 3.07 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = -6.37 \cdot 10^{-5}$  (nach Tab. 5.10) liefern die neuen Korrelationen. Ebenso liefern die neuen Korrelationen für  $N = 5$  für die  $\bar{H}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 6.66 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 3.49 \cdot 10^{-3}$  sowie auch der  $H_{max}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 7.18 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 5.12 \cdot 10^{-4}$  (nach Tab. 5.11) eine sehr gute Abschätzung. Das gleiche gilt auch für  $N = 9$ , wo für die  $\bar{H}/d_{eq}$  ein  $NMFQ = 2.83 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 5.05 \cdot 10^{-4}$  sowie für die  $H_{max}/d_{eq}$  ein  $NMFQ = 6.26 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 8.18 \cdot 10^{-4}$  (nach Tab. 5.12) erreicht wird.

### 5.5.2 Flammenlängen von DTBP-Poolfeuern

Die Flammenlängen wechselwirkender DTBP-Poolfeuer relativ zum Durchmesser  $d = d_s$  eines einzelnen Feuers aus der Maxtrixanordnung, sind in Abb. 5.25 dargestellt. Beispielsweise ergibt sich bei  $d = 6$  cm und  $N = 2$  für kleine  $D/d$  eine Zunahme der relativen zeitlich-gemittelten Flammenlängen um den Faktor  $\frac{H/d(D/d=0.08)}{H/d_s} = 1.28$ . Die relativen Flammenlängen nehmen mit zunehmendem  $D/d$  stetig ab und erreichen den Wert eines Einzelfeuers mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1$ .

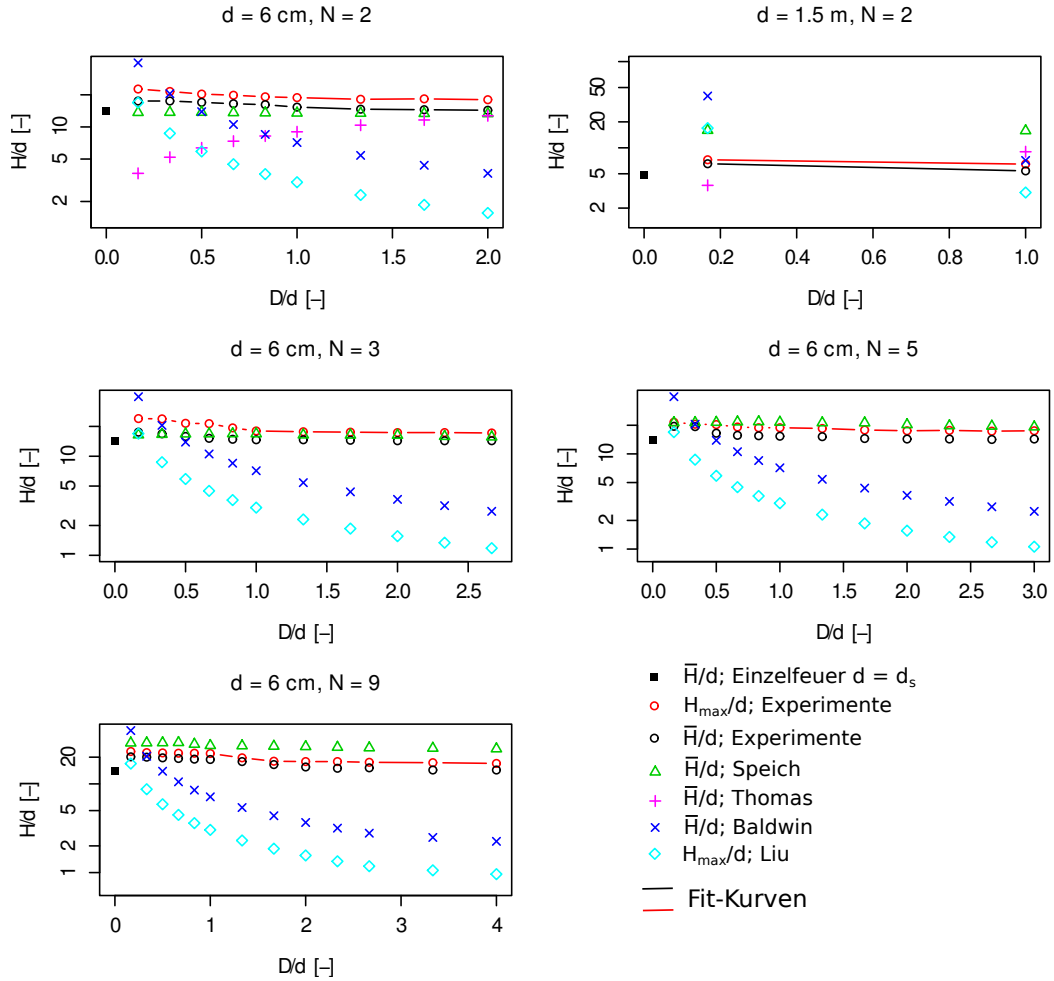


Abb. 5.25: Experimentelle und korrelierte  $\bar{H}/d_s$  und  $H_{\max}/d_s$  als Funktion des relativen Abstandes  $D/d$  für DTBP-Poolfeuer, vergleichend mit der Literatur aus Kap.2.15, dargestellt.

Die Zunahme von  $\bar{H}/d$  für kleine  $D/d$  und die Abnahme für große  $D/d$  liegen dabei in der selben Größenordnung, im Vergleich zu einem wechselwirkenden KW-Poolfeuer. Die Korrelation von Baldwin überschätzt die relativen  $\bar{H}/d$  von wechselwirkenden DTBP-Poolfeuern bei kleinen  $D/d$  um den Faktor 2.32, bei großen  $D/d$  hingegen unterschätzt die Baldwin-Korrelation die  $\bar{H}/d$  um den Faktor 3.9. Insgesamt ist die Abweichung der Baldwin-Korrelation von den experimentellen  $\bar{H}/d$  mit einem NMFQ = 0.085 und AF = 0.052 (nach Tab. 5.13) geringer, im Vergleich zu KW-Poolfeuern. Die von Thomas für  $N = 2$  analytisch entwickelte Korrelation unterschätzt die relativen  $\bar{H}/d$  bei kleinen  $D/d$  um den Faktor 4.8, wohingegen die relativen Flammenlängen für große  $D/d$ , nur um



Tab. 5.13: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 2$ ,  $0.16 \leq D/d \leq 2$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$2.43 \cdot 10^{-4}$	$3.14 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-3}$
AF [-]	$1.24 \cdot 10^{-3}$	$8.03 \cdot 10^{-4}$	0.019
	Thomas	Baldwin	Liu
NMFQ [-]	0.090	0.085	0.14
AF [-]	0.073	0.052	0.092
	Sugawa		
NMFQ [-]	$2.72 \cdot 10^{-4}$		
AF [-]	$-5.29 \cdot 10^{-3}$		

den Faktor 1.1 unterschätzt werden. Die Thomas-Korrelation ist mit einem  $\text{NMFQ} = 0.090$  und  $\text{AF} = 0.073$  (nach Tab. 5.13) im Bereich kleiner  $D/d$  recht ungenau, wohingegen die Übereinstimmung für große  $D/d$  gut ist. Für die relativen  $\bar{H}/d$  in Abb. 5.25 bietet die Speich-Korrelation die genaueste Beschreibung. Sowohl für kleine  $D/d$  mit  $\frac{H/d_s}{H/d(D/d=0.083), \text{Speich}} = 1.28$ , als auch für große  $D/d$  mit  $\frac{H/d_s}{H/d(D/d=1), \text{Speich}} = 1.1$  wird eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen erzielt, welche durch einen  $\text{NMFQ} = 3.3 \cdot 10^{-3}$  und  $\text{AF} = -0.019$  (nach Tab. 5.13) bestätigt wird.

Die maximalen relativen Flammenlängen  $H_{\max}/d$  werden von der Liu-Korrelation für kleine  $D/d$  um Faktor 1.33 unterschätzt, während die  $H_{\max}/d$  für große  $D/d$  um den Faktor 11.5 unterschätzt werden, wodurch ein  $\text{NMFQ} = 0.14$  und  $\text{AF} = 0.092$  (nach Tab. 5.13) erzielt wird.

Für ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer mit  $N = 2$  und  $d = 1.5$  m kommt es für kleine  $D/d$  zu einer Zunahme der relativen  $\bar{H}/d$  um den Faktor 1.33. Die Zunahme ist somit geringfügig größer als im Labormaßstab mit gleicher Konfiguration beobachtet. Ebenso ist die Zunahme um den Faktor 1.2 größer, im Vergleich zu KW-Poolfeuern. Für große  $D/d$  fallen die relativen  $\bar{H}/d$  auf den Wert eines einzelnen Feuers mit  $\frac{H/d(D/d=1.1)}{H/d_s} = 1.1$  ab. Die Baldwin-Korrelation überschätzt die relativen  $\bar{H}/d$  auch für größere Pooldurchmesser bei kleinen  $D/d$  um den Faktor 6.25, wobei auch für große  $D/d$  die  $\bar{H}/d$  um den

Tab. 5.14: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein DTBP-Poolfeuer mit  $d = 1.5$  m,  $N = 2$ ,  $0.16 \leq D/d \leq 1$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$1.43 \cdot 10^{-8}$	$1.00 \cdot 10^{-7}$	0.012
AF [-]	$-1.99 \cdot 10^{-5}$	$1.96 \cdot 10^{-4}$	0.015
	Thomas	Baldwin	Liu
NMFQ [-]	0.15	1.08	0.92
AF [-]	0.07	-0.43	-0.37
	Sugawa		
NMFQ [-]	0.010		
AF [-]	-0.068		

Faktor 1.32 überschätzt werden. Insgesamt ist die Abweichung der Baldwin-Korrelation von den experimentellen Werten mit einem NMFQ = 1.08 und AF = -0.43 (nach Tab. 5.14) auch für große Pooldurchmesser relativ groß, welches im Einklang mit den Ergebnissen für KW-Poolfeuer steht. Die Thomas-Korrelation unterschätzt die relativen  $\bar{H}/d$  für kleine  $D/d$  um den Faktor 2.7 und überschätzt die  $\bar{H}/d$  um den Faktor 1.1 für große  $D/d$ . Die Genauigkeit der Vorhersage bleibt über die hier untersuchten Pooldurchmesser und Brennstoffe relativ gleich, wobei die Vorhersage der Thomas-Korrelation mit einem NMFQ = 0.15 und einem AF = 0.07 (nach Tab. 5.14) etwas genauer ist als die Vorhersage der Baldwin-Korrelation. Die beste Vorhersage mit einem NMFQ = 0.012 und AF = 0.015 (nach Tab. 5.14) liefert auch hier die Speich-Korrelation, welche über den gesamten untersuchten Bereich der  $D/d$  die experimentellen Werte um den Faktor  $\approx 1.8$ , überschätzt.

Die Liu-Korrelation überschätzt, wie auch schon für kleine Durchmesser beobachtet, die  $H_{\max}/d$  für kleine  $D/d$  um den Faktor 2.6 und unterschätzt die  $H_{\max}/d$  für große  $D/d$  um den Faktor 1.8. Die Vorhersage der Liu-Korrelation ist für große  $d$  mit NMFQ = 0.92 und AF = -0.37 (nach Tab. 5.14) etwas genauer, im Vergleich zu kleineren  $d$ .

Für ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 3$  liegt für kleine  $D/d$  die Zunahme der relativen  $\bar{H}/d$  bei einem Faktor 1.24 und steigert sich für  $d = 6$  cm und  $N = 5$  auf den Faktor 1.4 sowie für  $d = 6$  cm und  $N = 9$

Tab. 5.15: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 3$ ,  $0.16 \leq D/d \leq 2.67$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$1.19 \cdot 10^{-4}$	$3.07 \cdot 10^{-4}$	$9.5 \cdot 10^{-4}$
AF [-]	$4.93 \cdot 10^{-4}$	$9.62 \cdot 10^{-4}$	$-7.4 \cdot 10^{-3}$
	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.11	0.5	$6.23 \cdot 10^{-4}$
AF [-]	0.054	0.12	$3.97 \cdot 10^{-3}$

auf den Faktor 1.42. Im Vergleich mit einem entsprechendem KW-Poolfeuer fällt auf, dass die Zunahme der  $\bar{H}/d$  bei einer großen Anzahl brennender Pools deutlich unter der von Kohlenwasserstoffen zurückbleibt. Für große  $D/d$  fallen die relativen  $\bar{H}/d$  mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1.0$  für  $N = 3$ , mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1.0$  für  $N = 5$  und mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 1.0$  für  $N = 9$  auf die  $\bar{H}/d$  eines einzelnen Poolfeuers mit  $d = d_s$  ab. Die Genauigkeit der Baldwin-Korrelation nimmt mit zunehmender Anzahl  $N$  zu, wobei die  $\bar{H}/d$  um den Faktor 11.4 für  $N = 3$ , um den Faktor 3.6 für  $N = 5$  und Faktor 2.0 für  $N = 9$  überschätzt wird. Die Baldwin-Korrelation ist somit für wechselwirkende DTBP-Poolfeuer genauer, im Vergleich zu wechselwirkenden KW-Poolfeuern. Für große  $D/d$  wird die  $\bar{H}/d$  im Falle von  $N = 3$  um den Faktor 5.2 unterschätzt, welches zu einem NMFQ = 0.11 und AF = 0.054 (nach Tab. 5.15) führt. Auch für  $N = 5$  werden die  $\bar{H}/d$  für große  $D/d$  um den Faktor 5.8 unterschätzt, welches ein NMFQ = 0.12 und AF = 0.058 (nach Tab. 5.16) liefert. Im Falle von  $N = 9$  werden für große  $D/d$  die  $\bar{H}/d$  ebenfalls um den Faktor 6.4 unterschätzt, welches zu einem NMFQ = 0.14 und AF = 0.065 (nach Tab. 5.17) führt. Die Speich-Korrelation liefert über den gesamten Bereich der  $D/d$ , eine genaue Abschätzung der relativen  $\bar{H}/d$ , sowohl für  $N = 3$  als auch für  $N = 5$ . Lediglich für  $N = 9$  wird die relative  $\bar{H}/d$  um den Faktor 1.4 überschätzt. Die Speich-Korrelation zeigt, wie auch schon bei den KW-Brennstoffen beobachtet, für das DTBP eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Diese gute Übereinstimmung spiegelt sich auch in den NMFQ =  $9.5 \cdot 10^{-4}$  und AF =  $-7.4 \cdot 10^{-3}$  (nach Tab. 5.15) für  $N = 3$ , NMFQ =  $7.6 \cdot 10^{-3}$  und AF = -0.024 (nach Tab. 5.16) für  $N = 5$  und NMFQ = 0.016 und AF = -0.034 (nach Tab. 5.17) für  $N = 9$  wieder. Die relativ gute Übereinstimmung der Speich-Korrelation mit den experimentellen Werten wird dadurch erreicht, dass für die Flammenlänge wichtige Parameter, wie die Massenabbrandrate und

Tab. 5.16: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 5$ ,  $0.16 \leq D/d \leq 3$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$2.48 \cdot 10^{-4}$	$4.37 \cdot 10^{-5}$	$7.6 \cdot 10^{-3}$
AF [-]	$1.22 \cdot 10^{-5}$	$1.62 \cdot 10^{-5}$	-0.024
	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.12	0.52	$2.00 \cdot 10^{-3}$
AF [-]	0.058	0.11	0.010

Tab. 5.17: NMFQ und AF nach Gln. 5.35 - 5.36 der neuen und bisherigen Korrelationen zur Bestimmung von  $\bar{H}/d$  und  $H_{\max}/d$  für ein DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm,  $N = 9$ ,  $0.16 \leq D/d \leq 4$

	neue Korrelation $\bar{H}/d_{\text{eq}}$	neue Korrelation $H_{\max}/d_{\text{eq}}$	Speich
NMFQ [-]	$4.76 \cdot 10^{-5}$	$8.52 \cdot 10^{-5}$	0.016
AF [-]	$2.87 \cdot 10^{-5}$	$2.18 \cdot 10^{-5}$	-0.034
	Baldwin	Liu	Sugawa
NMFQ [-]	0.14	0.56	$2.71 \cdot 10^{-3}$
AF [-]	0.065	0.11	0.011

die Dichte des Brennstoffdampfes, berücksichtigt werden. Eine Betrachtung der tatsächlichen Brennstoffoberfläche fehlt allerdings, wodurch eine noch bessere Vorhersage möglich sein sollte.

Die Liu-Korrelation unterschätzt die  $H_{\max}/d$  für kleine  $D/d$  um den Faktor 1.4 für  $N = 3$ , den Faktor 1.3 für  $N = 5$  und den Faktor 1.4 für  $N = 9$ . Für große  $D/d$  wird  $H_{\max}/d$  um den Faktor 14.6 für  $N = 3$ , den Faktor 16.5 für  $N = 5$  und den Faktor 17.7 für  $N = 9$  unterschätzt. Die Liu-Korrelation gibt auch den Verlauf der maximalen Flammenlängen im Falle von DTBP-Poolfeuern über den gesamten Bereich der  $D/d$  relativ ungenau wieder. Das spiegelt sich auch in den  $\text{NMFQ} = 0.5$  und  $\text{AF} = 0.12$  (nach Tab. 5.15) für  $N = 3$ ,  $\text{NMFQ} = 0.52$  und  $\text{AF} = 0.11$  (nach Tab. 5.16) für  $N = 5$  und  $\text{NMFQ} = 0.56$  und  $\text{AF} = 0.11$  (nach

Tab. 5.17) für  $N = 9$  wider.

Die Flammenlängen wechselwirkender DTBP-Poolfeuer relativ zum äquivalenten Durchmesser  $d = d_{eq}$  sind in Abb. 5.26 dargestellt.

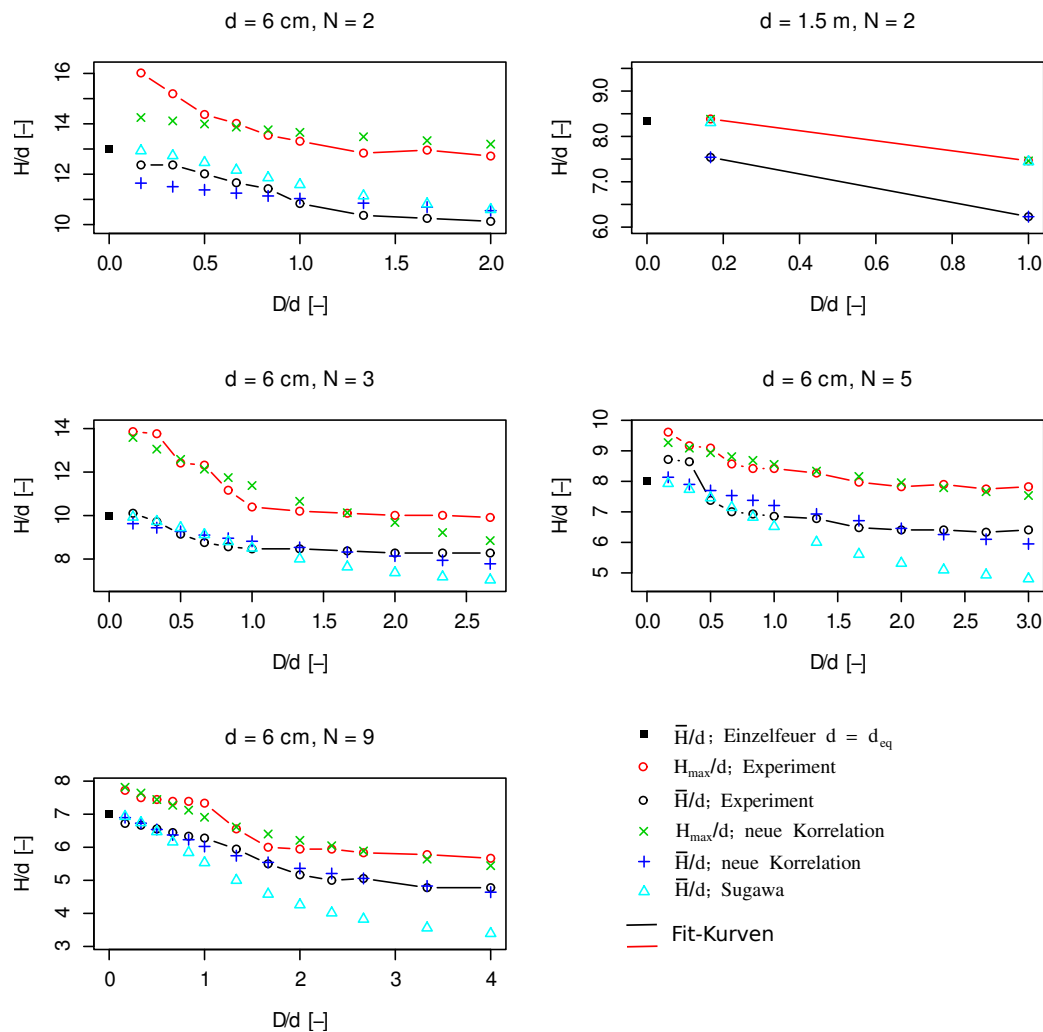


Abb. 5.26: Experimentelle und korrelierte  $\bar{H}/d_{eq}$  und  $H_{max}/d_{eq}$  als Funktion des relativen Abstandes  $D/d$  für DTBP-Poolfeuer, vergleichend mit der Literatur aus Kap.2.15, dargestellt.

Wie auch schon bei den KW-Poolfeuern beschrieben wird auf Basis von  $Q^*$  eine Korrelation der relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  bezogen auf den äquivalenten Durchmesser  $d = d_{eq}$  durchgeführt. Für wechselwirkende DTBP-Poolfeuer ergeben sich auf

Basis von  $Q^*$  für die zeitlich-gemittelten Flammenlängen die folgenden neuen Korrelationen:

$$\bar{H}/d_{eq} = \begin{cases} 6.04 Q^{*,0.18} & \text{für } N = 2 \\ 16.28 Q^{*,0.08} & \text{für } N = 3 \\ 16.08 Q^{*,0.10} & \text{für } N = 5 \\ 14.71 Q^{*,0.10} & \text{für } N = 9 \end{cases} \quad (5.53)$$

Für  $H_{max}/d_{eq}$  wechselwirkender DTBP-Poolfeuer sind die folgenden neuen Korrelationen gültig:

$$H_{max}/d_{eq} = \begin{cases} 7.75 Q^{*,0.11} & \text{für } N = 2 \\ 39.14 Q^{*,0.16} & \text{für } N = 3 \\ 14.55 Q^{*,0.07} & \text{für } N = 5 \\ 15.61 Q^{*,0.10} & \text{für } N = 9 \end{cases} \quad (5.54)$$

Beispielsweise resultiert für  $d = 6$  cm und  $N = 2$  bei kleinen  $D/d$  ein Verhältnis der relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  von  $\frac{H/d(D/d=0.083)}{H/d_{eq}} = 0.95$ . Die relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  nehmen mit zunehmendem  $D/d$  stetig ab und erreichen Werte von  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_s} = 0.79$ . Es kann somit gezeigt werden, dass die Flammenlängen wechselwirkender DTBP-Poolfeuer im Vergleich zu wechselwirkenden KW-Poolfeuern größere relative  $\bar{H}/d_{eq}$  zeigen, die auch mit zunehmendem  $D/d$  weniger stark abfallen. Die Korrelation von Sugawa überschätzt die relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  über den ganzen untersuchten Bereich der  $D/d$  um den Faktor 1.06 leicht, welches sich auch in einem  $NMFQ = 2.72 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = -5.29 \cdot 10^{-3}$  (nach Tab. 5.13) widerspiegelt. Eine noch genauere Abschätzungen der relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 2.43 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 1.24 \cdot 10^{-3}$  (nach Tab. 5.13) sowie auch der  $H_{max}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 3.14 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 8.03 \cdot 10^{-4}$  liefern die neuen Korrelationen.

Für ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer mit  $N = 2$  und  $d = 1.5$  m kommt es für kleine  $D/d$  zu einer Verringerung der relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  um den Faktor 1.12. Zu großen  $D/d$  hin fällt die relative  $\bar{H}/d_{eq}$  weit unterhalb der eines einzelnen Feuers mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_{eq}} = 0.75$ . Die Sugawa-Korrelation überschätzt die relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  auch für größere  $d$ , bei kleinen  $D/d$  um den Faktor 1.35, wobei auch bei großen  $D/d$  die  $\bar{H}/d_{eq}$  um den Faktor 1.78 überschätzt werden. Insgesamt ist die Abweichung der Sugawa-Korrelation von den experimentellen Werten mit einem  $NMFQ = 0.010$  und  $AF = -0.068$  (nach Tab. 5.14) für große  $d$  relativ groß. Wesentlich bessere Abschätzungen der relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 1.43 \cdot 10^{-8}$  und  $AF = -1.99 \cdot 10^{-5}$  sowie auch der  $H_{max}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 1.00 \cdot 10^{-7}$  und  $AF = 1.96 \cdot 10^{-4}$  liefern die neuen Korrelationen.

Für ein wechselwirkendes DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 3$  ergibt sich für kleine  $D/d$  ein Verhältnis der relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  von  $\frac{H/d(D/d=0.083)}{H/d_{eq}} = 1$ , für  $d = 6$  cm und  $N = 5$  von  $\frac{H/d(D/d=0.083)}{H/d_{eq}} = 1.09$  sowie für  $d = 6$  cm und  $N = 9$   $\frac{H/d(D/d=0.083)}{H/d_{eq}} = 0.97$ . Für große  $D/d$  fallen die relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_{eq}} = 0.84$  für  $N = 3$ , mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_{eq}} = 0.85$  für  $N = 5$  und mit  $\frac{H/d(D/d=1)}{H/d_{eq}} = 0.74$  für  $N = 9$  ab. Die Sugawa-Korrelation gibt die relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  für kleine  $D/d$  und für  $N = 3$  mit dem Faktor 1.03, für  $N = 5$  mit dem Faktor 1.01 und mit dem Faktor 1 für  $N = 9$  relativ genau wieder. Für große  $D/d$  werden die  $\bar{H}/d_{eq}$  im Falle von  $N = 3$  um den Faktor 1.1 unterschätzt, was einen  $NMFQ = 6.23 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 4.93 \cdot 10^{-4}$  (nach Tab. 5.15) liefert. Auch für  $N = 5$  werden die  $\bar{H}/d_{eq}$  für große  $D/d$  ebenfalls um den Faktor 1.4 unterschätzt, welches zu einem  $NMFQ = 7.6 \cdot 10^{-3}$  und  $AF = -0.024$  (nach Tab. 5.16) führt. Im Falle von  $N = 9$  werden für große  $D/d$  die  $\bar{H}/d_{eq}$  um den Faktor 1.43 unterschätzt, welches einem  $NMFQ = 2.71 \cdot 10^{-3}$  und  $AF = 0.011$  (nach Tab. 5.17) entspricht.

Wesentlich bessere Abschätzungen der relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  für  $N = 3$  mit einem  $NMFQ = 1.19 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 4.93 \cdot 10^{-4}$  sowie auch der  $H_{max}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 3.07 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 9.62 \cdot 10^{-4}$  (nach Tab. 5.15) liefern die neuen Korrelationen. Ebenso liefern die neuen Korrelationen für  $N = 5$  für die relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 2.48 \cdot 10^{-4}$  und  $AF = 1.22 \cdot 10^{-5}$  sowie auch der  $H_{max}/d_{eq}$  mit einem  $NMFQ = 4.37 \cdot 10^{-5}$  und  $AF = 1.62 \cdot 10^{-5}$  (nach Tab. 5.16) eine sehr gute Abschätzung. Das gleiche gilt auch für  $N = 9$ , wo für die relativen  $\bar{H}/d_{eq}$  ein  $NMFQ = 4.76 \cdot 10^{-5}$  und  $AF = 2.87 \cdot 10^{-5}$  sowie für die  $H_{max}/d_{eq}$  ein  $NMFQ = 8.52 \cdot 10^{-5}$  und  $AF = 2.18 \cdot 10^{-5}$  (nach Tab. 5.17) erreicht wird.

## 5.6 Spezifische Ausstrahlung von wechselwirkenden Poolfeuern

### 5.6.1 Gemessene und vorhergesagte spezifische Ausstrahlung von KW-Poolfeuern

Die spezifische Ausstrahlung  $\overline{SEP} = \bar{Q}_{a,rad}/A_F$  ist als eine typische „abgeleitete“ Größe sowohl theoretisch, als auch experimentell schwierig zu ermitteln, insbesondere infolge der Abhängigkeit von der nicht einfach zu messenden Flammenoberfläche  $A_F$  bzw. Flammenlänge  $H$ . Mit der CFD-Simulation kann bei einem Einzelpoolfeuer über drei verschiedene Methoden erfolgen [148]. In der ersten Methode wird die Flammenoberfläche als die Fläche mit einem Sauerstoffmassenanteil von  $\gamma_{O_2} = 0.22$  definiert. Hieraus ergibt sich für ein n-

Heptan Poolfeuer  $d = 6$  cm,  $D/d = 0.33$ ,  $N = 5$  eine  $\overline{\text{SEP}}_{\text{CFD},1} = 9 \text{ kW/m}^2$ . In der zweiten Methode wird die Flammenoberfläche  $A_F$  als Rechteckfläche aus  $\overline{H}$  und  $d$  genähert. Eine dritte Methode besteht in der CFD-Berechnung der Bestrahlungsstärken  $\overline{E}_{\text{CFD}}$  mit virtuellen Radiometern in bestimmten Abständen von der Flamme. Hieraus lässt sich die spezifische Ausstrahlung  $\overline{\text{SEP}}_{\text{CFD}}$  berechnen nach:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{CFD}} = \frac{\overline{E}_{\text{CFD}}}{\tau_{\text{at}} \alpha_E \varphi_{E,F}} \quad . \quad (5.55)$$

Durch Anwendung dieser Methode resultiert eine  $\overline{\text{SEP}}_{\text{CFD},3} = 16 \text{ kW/m}^2$  (s. Abb. 5.27). Es zeigt sich somit, dass die Methode 1 den experimentellen Wert von  $\overline{\text{SEP}}_{\text{exp}} = 18 \text{ kW/m}^2$  unterschätzt, während die Methode 3 (s. Abb. 5.27) eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen zeigt. Dagegen erwies sich die Methode 2 als prinzipiell zu ungenau und wurde daher bei wechselwirkenden Feuer nicht angewandt.

Die zeitlich gemittelten  $\overline{\text{SEPs}}$  wechselwirkender KW-Poolfeuer sind in der Abb. 5.27 dargestellt. Im Falle der thermischen Strahlung ist ein Bezug auf  $d = d_{\text{eq}}$  sinnvoll, da die thermische Strahlung entlang der optischen Weglänge gemessen wird und somit nicht mehr einem einzelnen Feuer zu geordnet werden kann. Die  $\overline{\text{SEP}}$  wechselwirkender KW-Feuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 2$  ist im Vergleich zur  $\overline{\text{SEP}}$  eines Poolfeuers mit  $d = d_{\text{eq}}$  um den Faktor

$\overline{\text{SEP}}(D/d = 0.16)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 8.4 \text{ cm}) = 1.4$  erhöht. Im Falle der wechselwirkenden Feuer mit  $d = 1.5$  m und  $N = 2$  ist die Zunahme um den Faktor  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 0.16)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 1.3 \text{ m}) = 1.3$  niedriger. Es ist zu erkennen, dass die  $\overline{\text{SEP}}$  für große  $D/d$  um den Faktor  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 1)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 1.3 \text{ m}) = 0.85$  niedriger ist, im Vergleich zur  $\overline{\text{SEP}}$  eines Einzelpoolfeuers mit  $d = d_{\text{eq}}$ . Die Steigerung der  $\overline{\text{SEP}}$  im Falle von  $d = 6$  cm und  $N = 3$  beträgt  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 0.16)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 10.4 \text{ cm}) = 1.3$  und vergrößert sich für  $d = 6$  cm und  $N = 5$  um den Faktor  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 0.16)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 13.4 \text{ cm}) = 2.1$ . Außerdem verringert sich die  $\overline{\text{SEP}}$  für große  $D/d$  im Falle von  $N = 3$  um den Faktor  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 1)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 10.4 \text{ cm}) = 0.95$  und für  $N = 5$  um den Faktor  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 1)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 13.4 \text{ cm}) = 0.9$ . Die  $\overline{\text{SEP}}$  nimmt bei einem Feuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 9$  um den Faktor  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 0.16)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 18 \text{ cm}) = 2.4$  zu, während bei kleineren  $N$  der Faktor geringer ist. Dagegen ist der Faktor für große  $D/d$  mit  $\overline{\text{SEP}}(D/d = 1.67)/\overline{\text{SEP}}(d_{\text{eq}} = 18 \text{ cm}) = 0.86$  kleiner. Wobei hier für kleine  $N$  dieser Faktor größer wird. Unabhängig von  $N$  zeigen die Funktionen der  $\overline{\text{SEP}}(D/d)$  einen maximalen Wert bei kleinen  $D/d$  und fallen für größere  $D/d$  stetig ab. Das Maximum der  $\overline{\text{SEP}}$  fällt dabei nicht, wie es etwa zu erwarten wäre, mit dem Maximum der Massenabbrandrate zusammen. Grund hierfür ist es, dass die  $\overline{\text{SEP}}$  als typische abgeleitete Größe entscheidend von



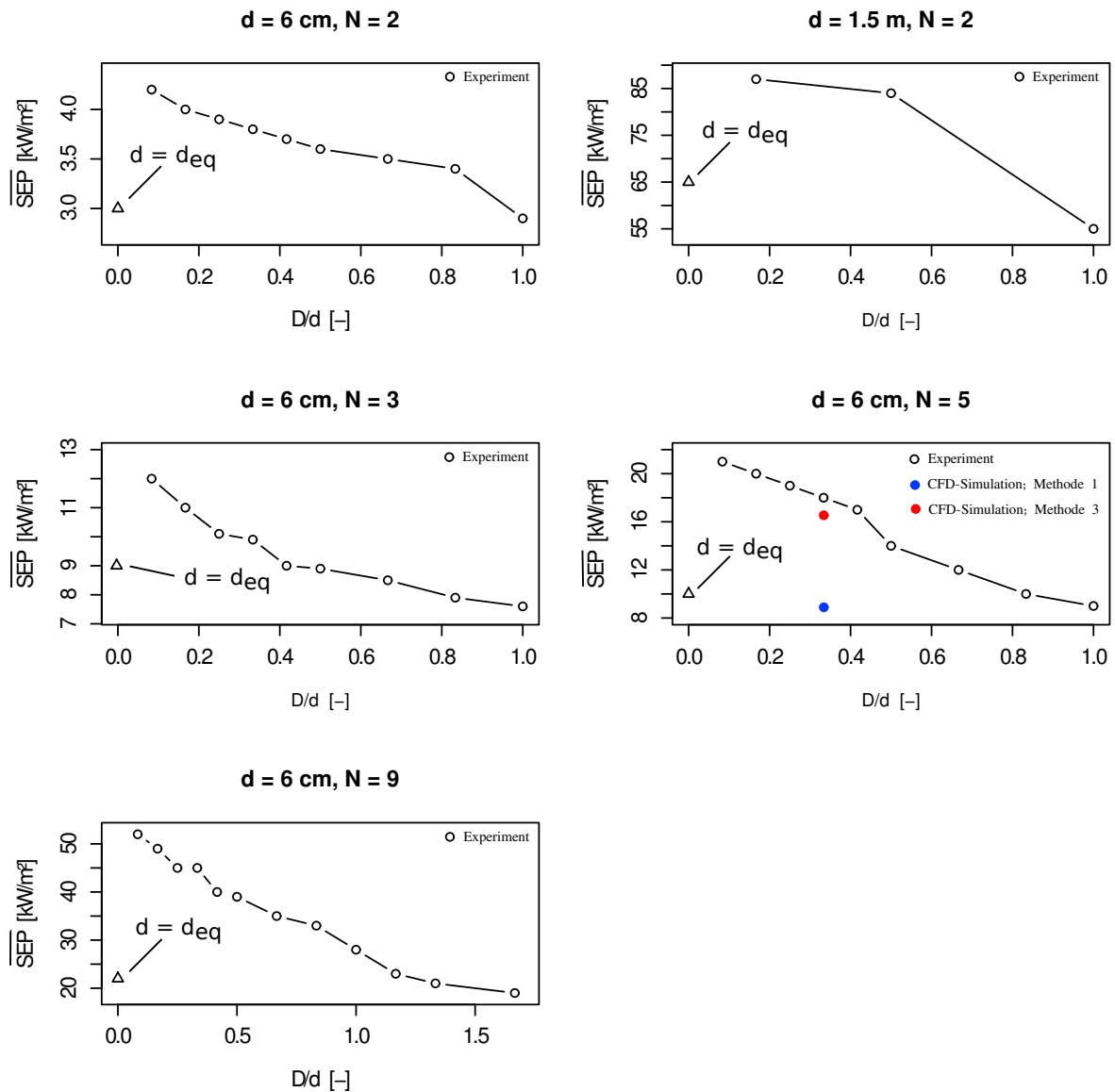


Abb. 5.27: Gemessene und CFD-vorhergesagte, zeitlich gemittelte spezifische Ausstrahlung ( $\overline{SEP}$ ) wechselwirkender KW-Poolfeuer in Abhängigkeit von  $D/d$

der Flammenoberfläche  $A_F$  abhängt. Die Flammenoberfläche wiederum ist stark von der Flammenlänge und dem Durchmesser der Flamme abhängig. Im Falle der wechselwirkenden Feuer haben die Flammen am Maximum der Massenabbrandrate ein größeres  $A_F$  und somit auch bei konstanten Bestrahlungsstärken  $E$  durch eine größere Einstrahlzahl  $\varphi_{E,F}$  (nach Gl. 2.57) zwischen der Flamme und einem Empfängererelement eine niedrigere  $\overline{SEP}(D/d)$ . Der stetig abfallenden Kurvenverläufe mit zunehmendem  $D/d$  können wie folgt erklärt werden. Bei Poolfeuern kommt es auf der Flammenachse zu einem Sauerstoffmangel und dementsprechend zu einem fetten Brennstoff/Luft-Gemisch und entsprechender Rußbildung. Das Äquivalenzverhältnis  $\Phi > 1$  bewirkt, dass keine vollständige stöchiometrische Umsetzung in Wasser und Kohlenstoffdioxid stattfindet und ein Verbrennungswirkungsgrad  $\eta_c < 1$  erzielt wird. In einem wechselwirkenden Feuer kann aufgrund der Abstände zwischen den Pools Umgebungsluft an Stellen in die Flamme eindringen an denen ansonsten Sauerstoffmangel herrschen würde, so dass  $\eta_c$  größer wird. Gleichzeitig führt ein erhöhtes Luft-Entrainment auch zu einer größeren Menge an Stickstoff, der erwärmt werden muss. Für kleine  $D/d$  ist die Erhöhung von  $\eta_c$  und die zusätzlich freigesetzte Energie größer als das zusätzliche Volumen an Stickstoff, welches erwärmt werden muss. Dagegen dominiert bei größeren  $D/d$  hingegen die zusätzlich eingesaugte, kalte Luft und die  $\overline{SEP}$  erniedrigt sich. Zudem führt ein mageres Brennstoff-Luft-Gemisch zu einer geringeren Rußbildung und somit zu einem kleineren  $\epsilon_F$ .

### 5.6.2 Gemessene spezifische Ausstrahlung von DTBP-Poolfeuern

Die zeitlich gemittelten  $\overline{SEPs}$  wechselwirkender DTBP-Poolfeuer sind in der Abb. 5.28 dargestellt. Die  $\overline{SEP}$  wechselwirkende Feuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 2$  ist dabei im Vergleich mit der  $\overline{SEP}$  eines einzelnen Poolfeuers mit  $d = d_{eq}$  um den Faktor  $\overline{SEP}(D/d = 0.16)/\overline{SEP}(d_{eq} = 8.4 \text{ cm}) = 1.7$  erhöht. Außerdem ist die  $\overline{SEP}$  für ein DTBP-Poolfeuer der gleichen Konfiguration um den Faktor  $\overline{SEP}_{DTBP}(D/d = 0.16)/\overline{SEP}_{KW}(D/d = 0.16) = 5.1$  größer als die  $\overline{SEP}$  von Heptan-Poolfeuern. Zu größeren  $D/d$  hin nimmt die  $\overline{SEP}$  wechselwirkender DTBP-Poolfeuer ab, wobei  $\overline{SEP}(D/d = 2)/\overline{SEP}(d_{eq} = 8.4 \text{ cm}) = 0.72$  erreicht wird. Die Zunahme der  $\overline{SEP}$  ist für  $d = 1.5$  m und  $N = 2$ , wie auch schon bei den wechselwirkenden KW-Poolfeuern beobachtet, mit  $\overline{SEP}(D/d = 0.16)/\overline{SEP}(d_{eq} = 1.3 \text{ m}) = 1.13$  deutlich geringer im Vergleich zu  $d = 6$  cm und  $N = 2$ . Auch die Abnahme der  $\overline{SEP}$  im Bereich großer  $D/d$  ist mit  $\overline{SEP}(D/d = 1)/\overline{SEP}(d_{eq} = 1.3 \text{ m}) = 0.93$  deutlich kleiner als für  $d = 6$  cm und  $N = 2$ . Bei wechselwirkenden DTBP-Poolfeuern mit  $d = 6$  cm und  $N = 3$  liegt die Zunahme mit  $\overline{SEP}(D/d = 0.16)/\overline{SEP}(d_{eq} = 10.4 \text{ cm}) = 2.0$  in der gleichen Größenordnung wie für  $N = 2$ . Die Abnahme der  $\overline{SEP}$  bei großen  $D/d$  ist hingegen

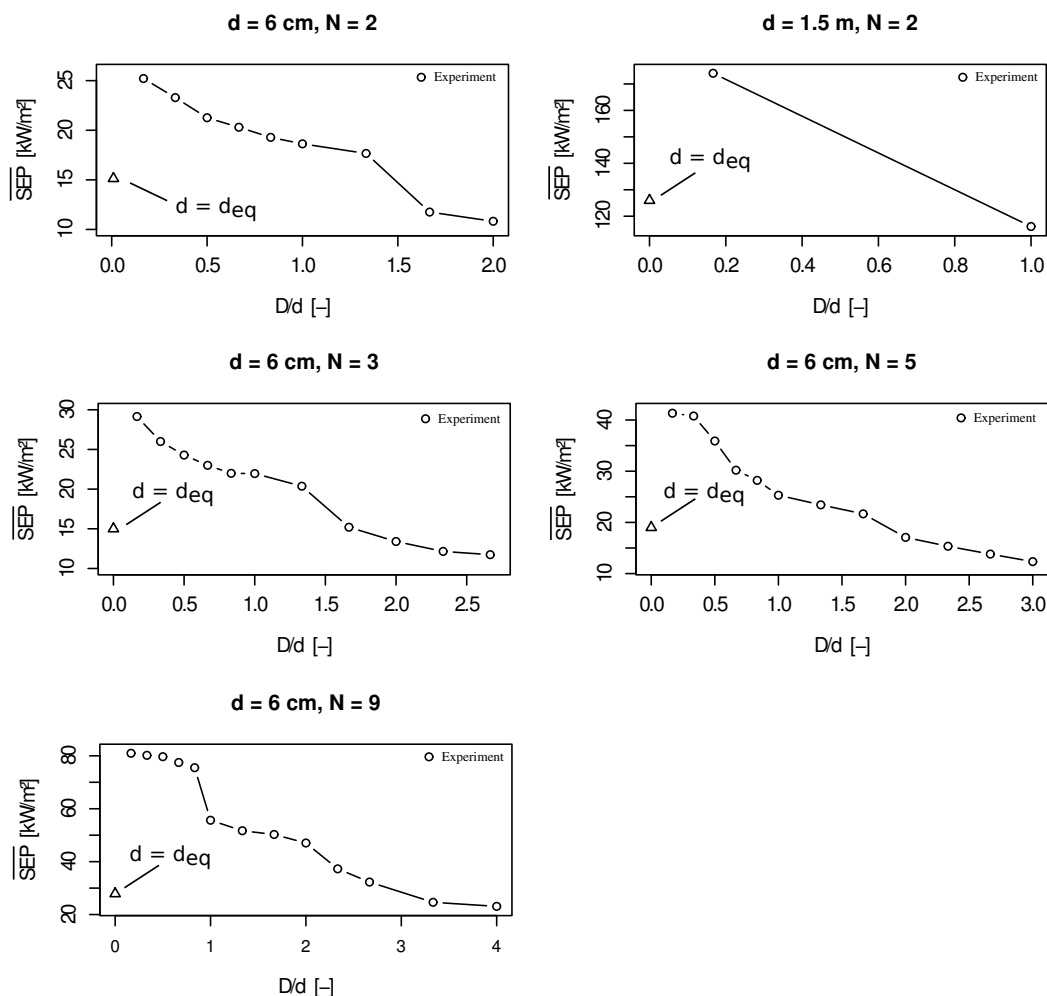


Abb. 5.28: Gemessene, zeitlich gemittelte spezifische Ausstrahlung ( $\overline{SEP}$ ) wechselwirkender DTBP-Poolfeuer in Abhängigkeit von  $D/d$

mit  $\overline{SEP}(D/d = 2.67)/\overline{SEP}(d_{eq} = 8.4 \text{ cm}) = 0.83$  im Vergleich zu  $d = 6 \text{ cm}$  und  $N = 2$  etwas größer. Im Vergleich zu KW-Poolfeuern der gleichen Konfiguration ist die Zunahme der  $\overline{SEP}$  um den Faktor 1.2 größer. Ebenso ist die Abnahme der Kurven bei großen  $D/d$  um den Faktor 1.1 größer als bei KW-Poolfeuern. Bei wechselwirkenden DTBP-Poolfeuern mit  $d = 6 \text{ cm}$  und  $N = 5$  und  $d = 6 \text{ cm}$  und  $N = 9$  bleibt die Zunahme der  $\overline{SEP}$  mit  $\overline{SEP}(D/d = 0.16)/\overline{SEP}(d_{eq} = 13.4 \text{ cm}) = 2.2$  für  $N = 5$  und  $\overline{SEP}(D/d = 0.16)/\overline{SEP}(d_{eq} = 18 \text{ cm}) = 2.4$  für  $N = 9$  nahezu konstant. Bei großen  $D/d$  wird eine Abnahme der  $\overline{SEP}$  um den Faktor  $\overline{SEP}(D/d = 3)/\overline{SEP}(d_{eq} = 13.4 \text{ cm}) = 0.65$  und für  $N = 9$  um den Faktor  $\overline{SEP}(D/d = 4)/\overline{SEP}(d_{eq} = 18 \text{ cm}) = 0.85$  beobachtet.

## Fehleranalyse bei der Ermittlung der spezifischen Ausstrahlung

Eine Abschätzung des Fehlers der gemessenen Massenabbrandraten soll anhand wechselwirkender DTBP-Poolfeuer mit  $d = 6$  cm und  $N = 2$  erfolgen. Über alle gemessenen  $D/d$  ergibt sich ein absoluter Fehler von  $\Delta\text{SEP} = 1.84$  kW/m<sup>2</sup> bei einer statistischen Sicherheit von  $\alpha = 0.9$ . Der angemessen kleine relativer Fehler beträgt  $(\Delta\text{SEP}/\text{SEP})_{\text{av}} = 0.42$ .

## 5.7 Bestrahlungsstärken von wechselwirkenden Poolfeuern

### 5.7.1 Bestrahlungsstärken von KW-Poolfeuern

Die experimentelle Ermittlung und Berechnung der entfernungsabhängigen Bestrahlungsstärken  $\bar{E}(\Delta y/d)$  nach Gl. 2.55 erfolgt am Beispiel eines Poolfeuers im Feldmaßstab mit  $N = 2$  und  $d = 1.5$  m. Der relative Abstand  $\Delta y/d = 0$  beginnt am Umkreis der entsprechenden Matrixanordnung. Dabei ergeben sich die in Abb. 5.29 abgebildeten Bestrahlungsstärken. Es ist zu erkennen, dass die Bestrahlungsstärken  $\bar{E}$  für die wechselwirkenden Feuer zwischen den relativen Abständen  $D/d = 0.16$  und  $D/d = 0.5$  für kleine  $\Delta y/d \leq 2$  bis um den Faktor  $\approx 2$  erhöht sind, im Vergleich zu einem Einzelfeuer. Nur bei großen  $D/d \geq 1$  sind die Bestrahlungsstärken auch bei kleinen  $\Delta y/d$  geringer, im Vergleich zu einem Einzelfeuer. Für sehr große  $\Delta y/d \geq 10$  nähern sich die Bestrahlungsstärken der wechselwirkenden Feuer denen eines Einzelfeuers an. Aus Abb. 5.29 sind außerdem die relativen kritischen thermischen Abstände  $\Delta y_{\text{crit}}/d$  für eine wahrscheinliche Feuerübertragung ( $E_{\text{crit}} = 8$  kW/m<sup>2</sup>), für Hautverbrennungen ( $E_{\text{crit}} = 5$  kW/m<sup>2</sup>) und für nachteilige Wirkung ( $E_{\text{crit}} = 1.6$  kW/m<sup>2</sup>) als Schnittpunkte zwischen  $E_{\text{crit}}/d = \text{const.}$  und den  $\bar{E}(\Delta y/d)$ -Kurven zu entnehmen, die in Kap. 5.8.1 näher diskutiert werden.

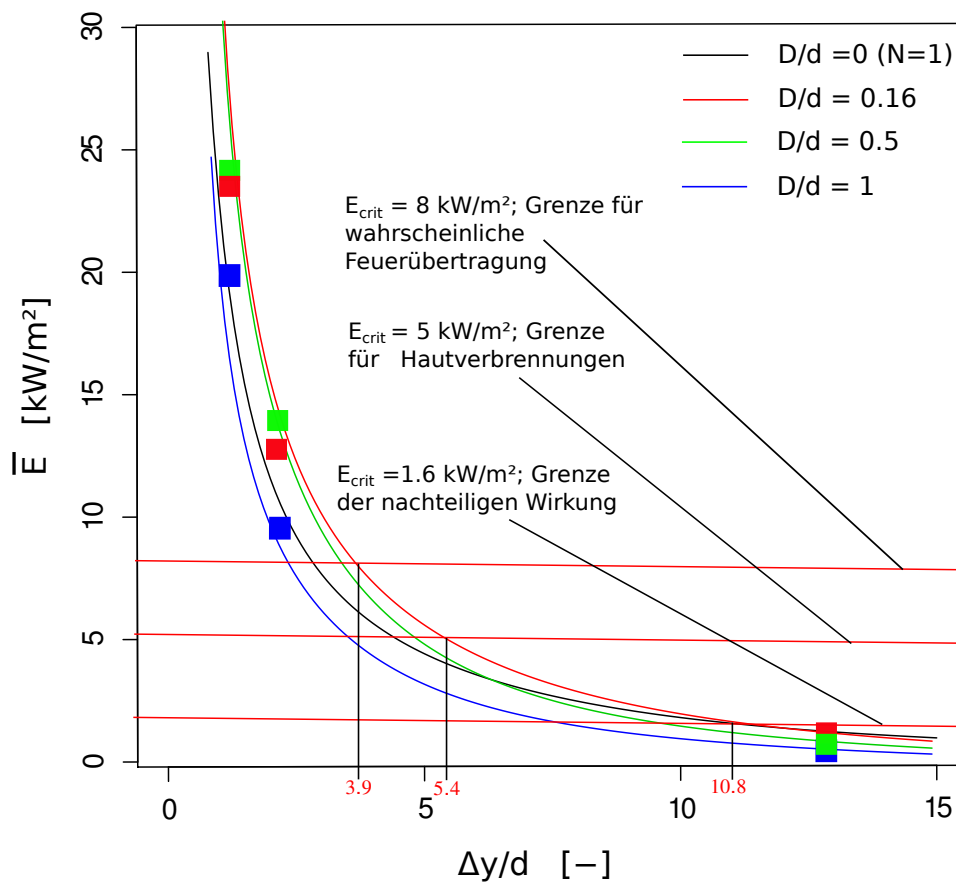


Abb. 5.29: Berechnete und gemessene zeitlich gemittelte Bestrahlungsstärken  $\bar{E}(\Delta y/d)$  wechselwirkender KW-Poolfeuer ( $N = 2$ ,  $d = 1.5$  m) als Funktion des relativen Abstandes  $\Delta y/d$  vom Umkreis der Matrixanordnung für verschiedene Poolabstände  $D/d$  sowie kritische Bestrahlungsstärken  $E_{crit}$

## 5.7.2 Bestrahlungsstärken von DTBP-Poolfeuern

Die entfernungsabhängigen Bestrahlungsstärken  $\bar{E}(\Delta y/d)$  werden nach Gl. 2.55 für DTBP-Poolfeuer im Feldmaßstab mit  $d = 1.5$  m,  $N = 2$  berechnet und sind in Abb. 5.30 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Bestrahlungsstärken  $\bar{E}$  zwischen  $D/d = 0.16$  und  $D/d = 1$  für kleine relative Abstände  $\Delta y/d$  bis um den Faktor 1.3 erhöht sind, im Vergleich zu einem Einzelfeuer. Bei sehr großen  $\Delta y/d > 10$  nähern sich die Bestrahlungsstärken der wechselwirkenden Feuer denen eines Einzelfeuers an. Aus Abb. 5.30 sind außerdem die relativen kritischen thermischen Abstände  $\Delta y_{crit}/d$  für eine wahrscheinliche Feuerübertragung ( $E_{crit} = 8$  kW/m²), für Hautverbrennungen ( $E_{crit} = 5$  kW/m²) und für nachteilige

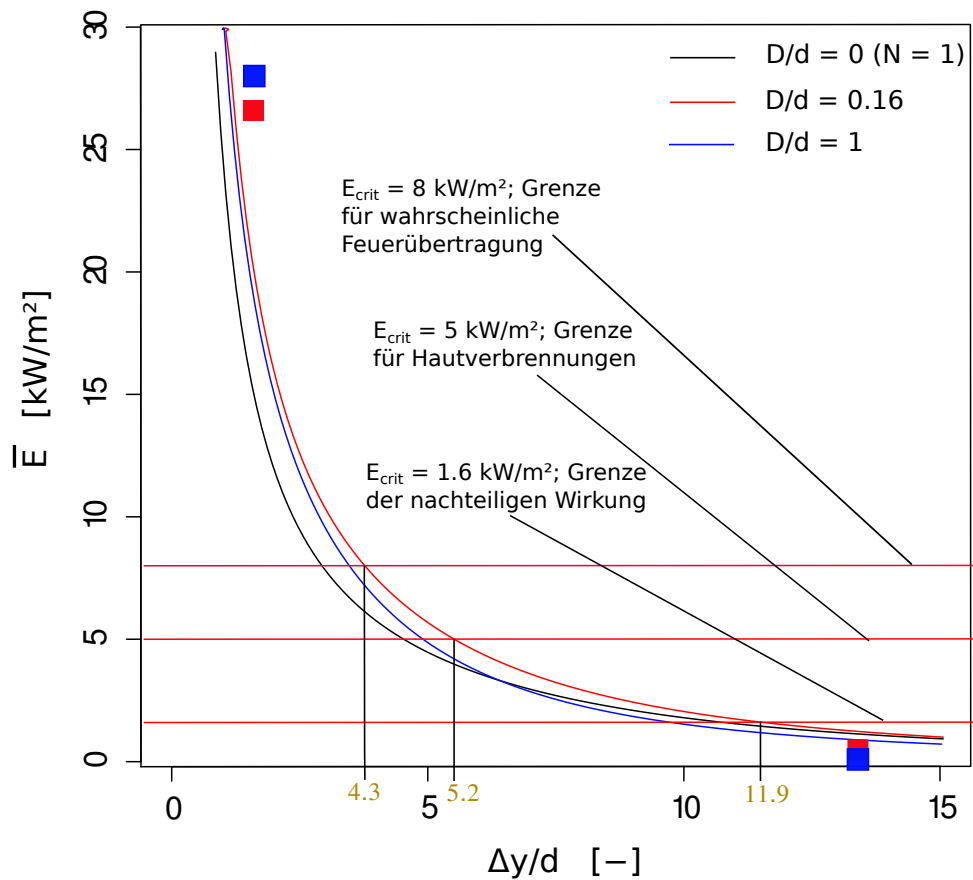


Abb. 5.30: Berechnete und gemessene zeitlich gemittelte Bestrahlungsstärken  $\bar{E}(\Delta y/d)$  wechselwirkender DTBP-Poolfeuer ( $N = 2$ ,  $d = 1.5 \text{ m}$ ) als Funktion des relativen Abstandes  $\Delta y/d$  vom Umkreis der Matrixanordnung für verschiedene Poolabstände  $D/d$  sowie kritische Bestrahlungsstärken  $E_{crit}$

Wirkung ( $E_{crit} = 1.6 \text{ kW/m}^2$ ) als Schnittpunkte zwischen  $E_{crit}/d = \text{const.}$  und den  $\bar{E}(\Delta y/d)$ -Kurven zu entnehmen, die in Kap. 5.8.2 näher diskutiert werden.

## 5.8 Thermische Abstände von wechselwirkenden Poolfeuern

### 5.8.1 Thermische Abstände von KW-Poolfeuern

Es wird ein dimensionsloser Parameter  $\Psi$  als Verhältnis des relativen kritischen thermischen Abstandes  $\Delta y_{\text{crit}}/d$  eines wechselwirkenden Feuers zu einem Einzelfeuer mit äquivalentem Durchmesser  $d = d_{\text{eq}}$  definiert:

$$\Psi = \frac{(\Delta y_{\text{crit}}/d)_{\text{multi}}}{(\Delta y_{\text{crit}}/d_{\text{eq}})_{\text{single}}} \quad (5.56)$$

Der Parameter  $\Psi$  ist ein Maß für die Abweichung des kritischen thermischen Abstandes eines wechselwirkenden Poolfeuers von dem kritischen thermischen Abstand eines Einzelfeuers. Die Parameter  $\Psi$  sind als Funktion des relativen Abstandes  $D/d$  zwischen den Pools für KW-Brennstoffe in Abb. 5.31 dargestellt. Für eine konservative Berechnung von  $\Psi(D/d)$  wechselwirkender Brände gelten für KW-Poolfeuer die folgenden empirischen Korrelationen:

$$\Psi(D/d) = \begin{cases} 1.36 & D/d < 0.3 \\ 0.44 (D/d)^2 - 1.46 (D/d) + 1.77 & D/d \geq 0.3 \end{cases} \quad (5.57)$$

Es wird erstmals berücksichtigt, dass die SEP einzelner Feuer nur vom Pooldurchmesser und nicht vom Poolvolumen abhängig ist.

Aus Abb. 5.31 geht hervor, dass die Mindestabstände  $(D/d)_{\text{min}}$  zwischen den Tanks nach TRbF 20 [95] im Falle von Rohöl und Schwefelkohlenstoff mit  $V > 10000 \text{ m}^3$ ,  $(D/d)_{\text{min}} \geq 0.6$  betragen. Es folgt aus  $\Psi \leq 1$ , dass für solche Tanks keine Erhöhung des kritischen thermischen Abstandes durch wechselwirkende Poolfeuern zu erwarten ist. Dagegen können die Abstände von  $(D/d)_{\text{min}} \geq 0.3$  für 10 Tanks mit  $V < 2000 \text{ m}^3$  oder  $(D/d)_{\text{min}} \leq 0.5$  für 4 Festdachtanks mit  $V \leq 50000 \text{ m}^3$  ( $\Psi \geq 1$ ) auf zu kleine Schutzstreifendurchmesser führen. In diesem beiden  $D/d$ -Bereichen ist mit einer Erhöhung der kritischen thermischen Abstände bis zu einem Faktor  $\Psi \approx 1.36$  zu rechnen.

Es wird eine worst-case Betrachtung für den Einfluss der Wechselwirkung von Bränden auf die kritischen thermischen Abstände am Beispiel eines wechselwirkenden KW-Poolfeuer mit  $N = 9$  und  $d = 5 \text{ m}$ ,  $(D/d)_{\text{min}} = 0.3$  durchgeführt, wobei mit einem Einzelpoolfeuer mit äquivalentem Durchmesser  $d_{\text{eq}} = 15 \text{ m}$  verglichen wird.

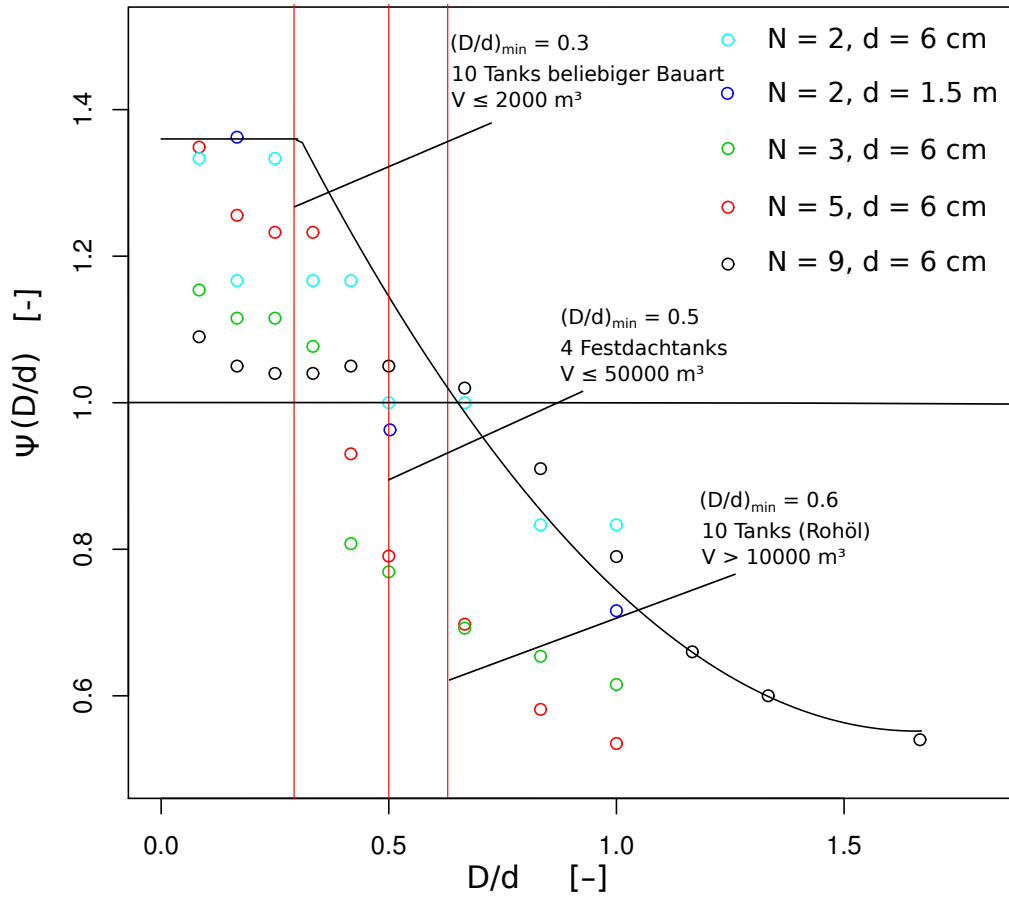


Abb. 5.31: Parameter  $\Psi(D/d)$  als Funktion des Poolabstandes  $D/d$  zur Abschätzung thermischer Abstände  $\Delta y_{\text{crit}}/d$  von wechselwirkenden KW-Poolfeuer

Es ist zu bemerken, dass das zusätzliche Gefährdungspotential durch wechselwirkende Poolflammen mit Durchmessern im Bereich  $1 \text{ m} < d < 5 \text{ m}$  infolge der zu erwartenden hohen SEP und bei einem kleinen Schutzstreifendurchmesser, besonders hoch ist. Für ein Einzelpoolfeuer ( $d_{\text{eq}} = 15 \text{ m}$ ) mit einer  $\overline{\text{SEP}} = 50 \text{ kW/m}^2$  [15] und einer Flammenlänge von  $\bar{H} = 1.8 d = 27 \text{ m}$  [15] ergibt sich für die Grenze für wahrscheinliche Feuerübertragung ( $E_{\text{crit}} = 8 \text{ kW/m}^2$ ) ein kritischer thermischer Abstand von  $\Delta y_{\text{crit}}/d = 1.6$ . Nach TRbF 20 ist in diesem Fall ( $V \approx 850 \text{ m}^3$ ) ein relativer Schutzstreifendurchmesser von  $(\Delta y_{\text{crit}}/d)_{\text{SD}} = 1.2$  vorgesehen. Hieraus folgt, dass der kritische thermische Abstand  $(\Delta y_{\text{crit}}/d)$  für  $E_{\text{crit}} = 8 \text{ kW/m}^2$  somit um den Faktor 1.8 größer ist als  $(\Delta y_{\text{crit}}/d_{\text{eq}})_{\text{single}} \approx 1.2$ . Die Konsequenz daraus ist, dass ein wechselwirkendes Feuer die Brandausbreitung innerhalb eines Tanklagers fördert. Die Schutzstreifendurchmesser  $(\Delta y/d)_{\text{SD}}$  nach



TRbF 20 für  $(D/d)_{\min} = 0.3$  erweisen sich demnach um den Faktor  $\approx 0.6$  zu klein. Da die relativen Abstände  $\Delta y_{GG}/d$  zwischen den einzelnen Tankgruppen einen Wert von  $D/d_{\min} = 0.6$  überschreiten, ist eine Wechselwirkung von Tankgruppen nicht zu erwarten ( $\Psi < 1$ ), so dass Effekte durch die Wechselwirkung von Bränden auf Tanks innerhalb einer Tankgruppe beschränkt bleiben. Aus den obigen Ausführungen folgt auch, dass sich die Schutzstreifendurchmesser nach TRbF 20, erstmals auf physikalischen Modellvorstellungen basierend abschätzen lassen.

### 5.8.2 Thermische Abstände von DTBP-Poolfeuern

Die Funktion  $\Psi(D/d)$  ist für wechselwirkende DTBP-Poolfeuer in Abb. 5.32 dargestellt. Für eine konservative Berechnung der Wechselwirkung von Bränden

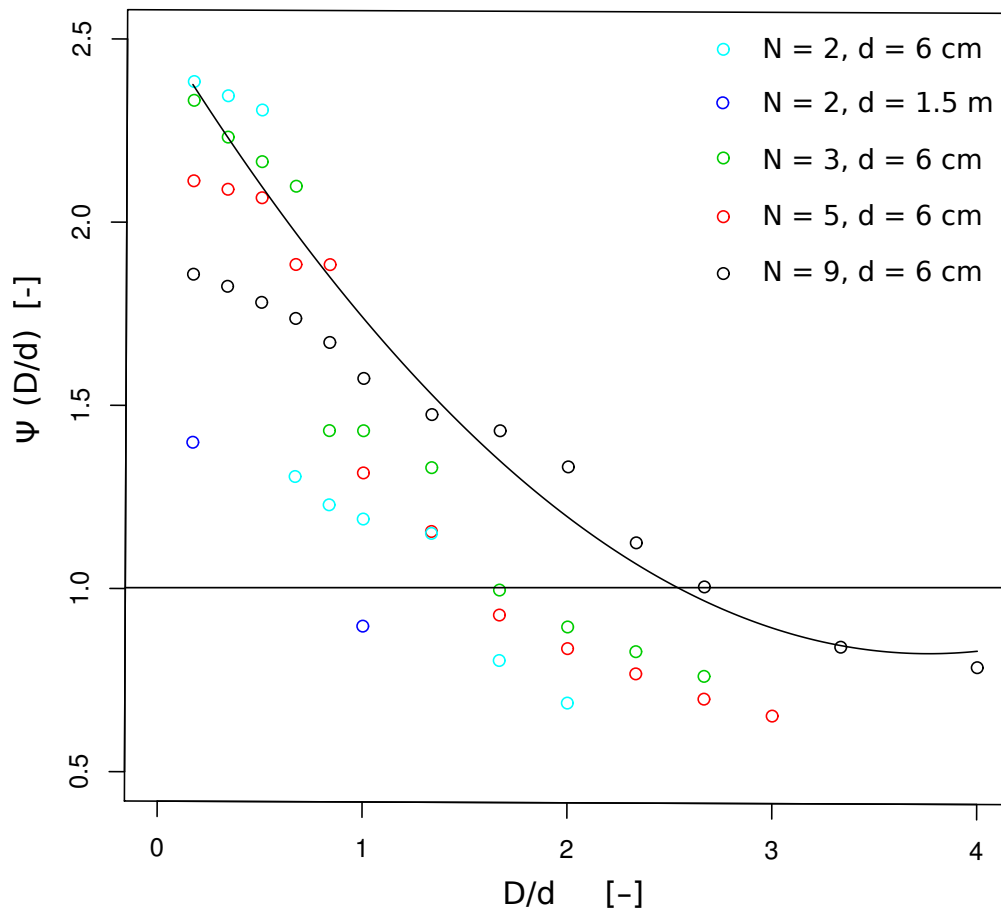


Abb. 5.32: Parameter  $\Psi(D/d)$  als Funktion vom Poolabstand  $D/d$  für wechselwirkenden DTBP-Poolfeuer

lässt sich  $\Psi(D/d)$  für DTBP-Poolfeuer durch die folgende Funktion beschreiben ( $d = d_{eq}$ ):

$$\Psi = 0.12 (D/d)^2 - 0.90 (D/d) + 2.52 \quad . \quad (5.58)$$

Im Unterschied zu KW-Brennstoffen zeigt die  $\Psi(D/d)$ -Kurve für DTBP-Poolfeuer nur einen stetigen Abfall. Die Parameter  $\Psi(D/d)$  sind für Peroxid-Feuer im Vergleich zu KW-Poolfeuern um den Faktor 1.8 größer. Auch das  $D/d$ , ab dem keine Wechselwirkung mehr erfolgt, ist bei Peroxid-Poolfeuern mit  $\Psi(D/d) = 2.7$  um den Faktor 4.5 größer als bei den KW-Poolfeuern. Da Peroxide nicht nach TRbF 20 gelagert werden dürfen, ist ein direkter Vergleich mit KW-Poolfeuern schwierig. Peroxide werden nach BGV B4 gelagert [96], in der auch die zugehörigen Sicherheitsabstände geregelt sind. Die BGV B4 sieht als Sicherheitsmaßnahmen vor, dass die Ausgänge von Sozialgebäuden auf der der Wirkungsseite abgewandten Wand liegen müssen. Somit sind bei einer möglichen Evakuierung Menschen der thermischen Strahlung nur kurzzeitig ausgesetzt und es wird eine kritische Bestrahlungsstärke von  $E_{crit} = 5 \text{ kW/m}^2$  nach NFPA [174] angenommen. Diese Bestrahlungsstärke entspricht einer Zeit von 30 s bis Verbrennungen 1. Grades auf ungeschützter Haut auftreten [175]. Es wird davon ausgegangen, dass diese Zeit ausreichend ist, bis sich alle betroffenen Menschen außerhalb des Wirkungsbereiches des Feuers bewegen können. Da die tatsächlichen Expositionszeiten also als relativ kurz angenommen werden können, kann die Grenze  $E_{crit} = 1.6 \text{ kW/m}^2$  nach EN 1473 [176] vernachlässigt werden. Es muss daher sichergestellt sein, dass die thermischen Abstände zu Sozialgebäuden die Bestrahlungsstärken  $E_{crit} = 8 \text{ kW/m}^2$  und  $E_{crit} = 5 \text{ kW/m}^2$  nicht überschreiten. Zudem darf der Freilager-Freilager-Abstand ein  $E_{crit} = 8 \text{ kW/m}^2$  nicht überschreiten.

Als worst-case Betrachtung für wechselwirkende DTBP-Brände soll der Brand von 9 Kunststoff-IBCs ( $d \approx 1.1 \text{ m}$ ,  $V_{IBC} = 9 \cdot (1.1 \text{ m} \cdot 1.16 \text{ m} \cdot 1 \text{ m}) = 11.84 \text{ m}^3$  ausgelaufene Flüssigkeit in jeweils separaten Wannen) in einem relativen Abstand von  $D/d = 0.16$  im Freilager angenommen werden, da hier eine kleine Masse an Peroxid und somit ein kleiner Sicherheitsabstand mit einer großen thermischen Strahlung kombiniert wird. Nach BGV B4 folgt hieraus für eine Masse von  $m = \rho_{DTBP} V_{IBC} = 9897 \text{ kg}$  DTBP ein Sicherheitsabstand von  $\Delta y_{min}^{FS} = 46 \text{ m}$  zwischen Freilagern und Sozialgebäuden und ein Sicherheitsabstand von  $\Delta y_{min}^{FF} = 35 \text{ m}$  zwischen zwei Freilagern. Für die relativen Abstände  $D/d = 0.16$  zwischen den Pools bzw. IBCs erfolgt eine Zunahme des Parameters  $\Psi$  auf  $\Psi = 2.4$ . Mit  $d_{eq} = 3.3 \text{ m}$  ergibt sich nach Gl. 2.55 mit einer  $\overline{SEP} = 240 \text{ kW/m}^2$  [31], einem atmosphärischen Transmissionsgrad  $\tau_{at} = 1$ , einem Absorptionsgrad des Empfänger-elementes  $\alpha_E = 1$  für  $E_{crit} = 5 \text{ kW/m}^2$  eine maximale Einstrahlzahl von  $\phi_{E,F,max} = 0.0087$  sowie für  $E_{crit} = 8 \text{ kW/m}^2$  eine maximale Einstrahlzahl von  $\phi_{E,F,max} = 0.014$ . Mit den Gln. 2.57 - 2.59 resultieren für eine mittlere relative

Flammenlänge von  $\bar{H} = 11$  m [31] für das wechselwirkende DTBP-Poolfeuer die kritischen thermischen Abstände von  $\Delta y_{\text{crit}} = 47$  m (für  $E_{\text{crit}} = 5$  kW/m<sup>2</sup>) und  $\Delta y_{\text{crit}} = 36$  m (für  $E_{\text{crit}} = 8$  kW/m<sup>2</sup>). Es lassen sich die Sicherheitsabstände  $\Delta y_{\text{min}}$  nach BGV B4 erstmals auf physikalischen Modellvorstellungen basierend berechnen:

$$\Delta y_{\text{min}}^{\text{FS}} \gg \Delta y_{\text{crit}}(E_{\text{crit}} = 8 \text{ kW/m}^2) \approx 36 \text{ m}, \quad (5.59)$$

$$\Delta y_{\text{min}}^{\text{FS}} \approx \Delta y_{\text{crit}}(E_{\text{crit}} = 5 \text{ kW/m}^2) \approx 47 \text{ m}, \quad (5.60)$$

$$\Delta y_{\text{min}}^{\text{FF}} \approx \Delta y_{\text{crit}}(E_{\text{crit}} = 8 \text{ kW/m}^2) \approx 36 \text{ m}. \quad (5.61)$$

Es zeigt sich also, dass die großen Sicherheitsabstände  $\Delta y_{\text{min}}^{\text{FS}}$  zwischen Freilagern und Sozialgebäuden eine Feuerübertragung unmöglich machen sollten (s. Gl. 5.59). Ebenso ist eine Gefährdung von Menschen relativ gering, da für  $E_{\text{crit}}=5$  kW/m<sup>2</sup> die  $\Delta y_{\text{crit}}$  gleich den nach BGV B4 im Anhang A geforderten Sicherheitsabständen  $\Delta y_{\text{min}}^{\text{FF}} \approx 35$  m sind (s. Gl. 5.60). Ähnliches gilt für die Freilager-Freilager-Abstände  $\Delta y_{\text{min}}^{\text{FF}} \approx 35$  m ( $E_{\text{crit}}=8$  kW/m<sup>2</sup>), die mit dem berechneten kritischen thermischen Abstand  $\Delta y_{\text{crit}} = 36$  m (für  $E_{\text{crit}}=8$  kW/m<sup>2</sup>) erstmals physikalisch interpretiert werden können. Die vorliegenden Berechnungen zeigen eine gute Bestätigung der Sicherheitsabstände nach BGV B4.



## 6 Sicherheitstechnische Folgerungen

Es ergeben sich die folgenden sicherheitstechnischen Aspekte:

- Für  $(D/d)_{\min} = 0.6$  und  $V > 10000 \text{ m}^3$  sind die Tankabstände nach TRbF 20 innerhalb einer Tankgruppe ausreichend groß, um eine Wechselwirkung von Bränden zu verhindern. Das zusätzliche Gefährdungspotential infolge der Wechselwirkung von Bränden bei brennbaren Flüssigkeiten der Gefahrenklasse A ist bei Poolfeuern ( $1 \text{ m} < d < 5 \text{ m}$ ) besonders hoch. Die Schutzstreifendurchmesser nach TRbF 20 stellen sich insbesondere bei wechselwirkenden Bränden mit diesen Pooldurchmessern als zu klein heraus. Für wechselwirkende Brände mit  $d > 5 \text{ m}$  ist das zusätzliche Gefährdungspotential für KW-Poolfeuer relativ gering, da die Tankabstände  $(D/d)_{\min}$  bei größeren Tankvolumina zunehmen. Allerdings ist das Gefährdungspotential von KW-Einzelpoolfeuern so groß, dass die Schutzstreifendurchmesser nach TRbF 20 deutlich zu klein sind.
- Die Berechnungen zeigen für Peroxid-Poolfeuer eine Bestätigung der Sicherheitsabstände nach BGV B4:

$$\Delta y_{\min}^{\text{FS}} \approx 48 \text{ m}, \Delta y_{\min}^{\text{FF}} \approx 35 \text{ m}$$

$$\Delta y_{\min}^{\text{FS}} \gg \Delta y_{\text{crit}}(E_{\text{crit}} = 8 \text{ kW/m}^2) \approx 36 \text{ m},$$

$$\Delta y_{\min}^{\text{FS}} \approx \Delta y_{\text{crit}}(E_{\text{crit}} = 5 \text{ kW/m}^2) \approx 47 \text{ m},$$

$$\Delta y_{\min}^{\text{FF}} \approx \Delta y_{\text{crit}}(E_{\text{crit}} = 8 \text{ kW/m}^2) \approx 36 \text{ m}.$$



# Literaturverzeichnis

- [1] M. Gawlowski, M. Hailwood, I. Vela, A. Schönbucher, Chem.-Eng.-Technol. 32(2) (2009) 182.
- [2] H. Persson, A. Lönnermark, Tank Fire Review of Fire Incidents 1951 - 2003, Swedish National Testing and Research Institute, Borås, Sweden, 2004.
- [3] C. Balluf, W. Brötz, D. Göck, N. Schieß, A. Schönbucher, Chem.-Ing.-Tech. 57(10) (1985) 823.
- [4] M. Hailwood, M. Gawlowski, B. Schalau, A. Schönbucher, Chem.-Eng.-Technol. 32(2) (2009) 207.
- [5] U. Hauptmanns, J. Hazard. Mater. 125 (2005) 1.
- [6] N. Liu, Q. Liu, J. S. Lozano, L. Zhang, K. Zhu, Z. Deng, K. Satoh, Proc. Combust. Inst. 32 (2009) 2519.
- [7] A. Schönbucher, S. Schälike, I. Vela, K.-D. Wehrstedt, CFD Simulation of Large Hydrocarbon and Peroxide Pool Fires, in J. Schmidt (ed.), Process and Plant Safety; Applying Computational Fluid Dynamics, Wiley & VCH, Weinheim, 2012.
- [8] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, Combustion, Springer, 4. Aufl., 2006.
- [9] P. Gerlinger, Numerische Verbrennungssimulation, Springer, 2005.
- [10] F. Joos, Technische Verbrennung, Springer, 2006.
- [11] A. Schönbucher, Schwere Gase und Sicherheitsanalyse IX, Battelle-Eigenverlag, Frankfurt am Main, 1992.
- [12] S. Mannan, Lees Loss Prevention in the Process Industries, Butterworth-Heinemann, London, 3. Auflage, 2005.
- [13] W. Elsner, Gefährliche Ladung 28(2) (1983) 73.
- [14] Methods for calculation of the physical effects (Yellow Book), CPR 14E (Part 2, Chap. 6: Heat Flux from Fires, 6.1-6.130), 3. Aufl., 1997.

- [15] A. Schönbucher (ed.), Quellterme bei Flüssigkeitsbränden in: Statuspapier, Quelltermberechnung bei störungsbedingten Stoff- und Energiefreisetzungen in der Prozessindustrie Methodenübersicht und industrielle Anwendung, ProcessNet Fachgemeinschaft Anlagen- und Prozesssicherheit, Frankfurt am Main, 2012, e-book, ISBN: 978-3-89746-135-2.
- [16] S. Schälke, A. Schönbucher, Pool fires, in: Ullmann's Reaction Engineering 2, Part 4 Plant and Process Safety 1057-1070, 2013.
- [17] F. Spiegel Online, Online: <http://www.spiegel.de/fotostrecke/0,5538,11814,00.html>, 2009, Spiegel Online, 2005.
- [18] D. Göck, Blockierung der Wärmestrahlung durch Ruß bei großen Diesel-Benzin-Poolflammen, Dissertation, Universität Stuttgart, 1985.
- [19] B. Arnold, V. Banhardt, V. Bieller, H. Kasper, M. Kaufmann, R. Lucas, N. Schieß, A. Schönbucher, Proc. Comb. Inst. 21 (1988) 83.
- [20] D. Göck, A. Kettler, D. Krattenmacher, N. Schieß, A. Schönbucher, Proc. Comb. Inst. 21 (1988) 93.
- [21] A. Hamins, J. C. Yang, I. Kashiwagi, Proc. Combust. Inst. 24 (1992) 1695.
- [22] J. A. Fay, J. Hazard. Mater. B136 (2006) 219.
- [23] P. K. Raj, J. Hazard. Mater. 140 (2007) 2007.
- [24] W. Brötz, A. Schönbucher, Chem.-Ing.-Tech. 50(8) (1978) 573.
- [25] R. Fiala, D. Göck, X. Zang, A. Schönbucher, Chem.-Ing.-Tech. 63(7) (1991) 760.
- [26] M. Krautwurst, ADR 2009, Verkehrsverlag Fischer, 2009.
- [27] E. G. E. Hawkins, Organic Peroxides, F. F. Spon (ed.), 1961.
- [28] Ullmann's Encyklopädie der technischen Chemie, Organische Peroxide und Peroxysäuren, Verlag Chemie, Weinheim, 1979.
- [29] D. Swern, Organic Peroxides, Volume 1, Wiley-Interscience, New York, 1970.
- [30] K.-D. Wehrstedt, P.-A. Wandrey, Abbrandverhalten von flüssigen explosionsfähigen Stoffen in Abhängigkeit von der Pool-Größe, PTB-Bericht 54, 1993, 97.



- [31] H. Chun, Experimentelle Untersuchungen und CFD-Simulationen von DTBP-Poolfeuern, Dissertation, BAM Disserationsreihe 23, 2007.
- [32] K. B. Mishra, Experimental investigation and CFD simulation of organic peroxide pool fires (TBPB and TBPEH) , Dissertation, BAM Disserationsreihe 63, 2010.
- [33] S. W. Benson, J. Chem. Phys. 40 (1964) 1007.
- [34] A. V. Tobolsky, R. B. Mesrobian, Organic Peroxides, Interscience Publishers, New York, 1954.
- [35] G. O. Schenck, K. Ziegler, Naturwissenschaften 32 (1944) 125.
- [36] K. S. Pitzer, J. Am. Chem. Soc. 70 (1948) 2140.
- [37] C. Rüchardt, Fortschr. Chem. Forsch. 6 (1966) 251.
- [38] I. S. Voloshanovskii, S. S. Ivanchev, Zh. Obshch. Khim. 44(1) (1974) 892.
- [39] P. D. Bartlett, R. R. Hiatt, J. Am. Chem. Soc. 80 (1958) 1398.
- [40] R. Criegee, Ber. Dtsch. Chem. Ges. B77 (1944) 722.
- [41] M. Frenlach, D. W. Clary, W. C. Gardiner, S. E. Stein, Proc. Combust. Instit. 21 (1986) 632.
- [42] H. Bockhorn, Soot Formation in Combustion (Ed. h. Bockhorn), Springer, 1994, 3-7.
- [43] H. Bockhorn, T. Schäfer, Soot Formation in Combustion (Ed. H. Bockhorn), Springer, 1994, 253-274.
- [44] K. S. Mudan, P. A. Croce, in: P. J. DiNenno et al. (eds.), SFPE Handbook of Protection Engineering, National Fire Protection Association; Quincy, MA, Section 3, 2. Aufl., Chap. 11, 3-197 bis 3-240, 1995.
- [45] K. S. Mudan, Prog. Energy Combust. Sci. 10 (1984) 59.
- [46] C. L. Beyler, in P. J. DiNenno et al. (eds.), SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, 3. Aufl., Section 3, Chap. 11, 3-314, 2002.
- [47] V. I. Blinov, G. N. Khudiakov, Academia Nank, 1957, SSSR Doklady, pp. 177.
- [48] H. C. Hottel, Fire Res. Abstr. Rev. 1 (1959) 41.

- [49] H. G. Werthenbach, VDI-Zeitschrift 115 (1973) 383.
- [50] H. G. Werthenbach, Forschung Technik Brandschutz 25 (1976) 57.
- [51] M. Hertzberg, Combust. Flame 21(2) (1973) 195.
- [52] D. S. Burgess, M. G. Zabetakis, Fire and Explosion Hazards Associated with LNG, 1962, US Bureau of Mines Report 6099.
- [53] J. Grumer, A. Strasser, T. A. Kubala, D. S. Burgess, FireRes. Abstr. Rev. 3 (1961) 159.
- [54] V. Babrauskas, Fire Technol. 19 (1983) 251.
- [55] E. E. Zukoski, B. M. Cetegen, T. Kubota, Proc. Combust. Inst. 20 (1985) 361.
- [56] P. Thomas, Proc. Combust. Inst. 9 (1963) 844.
- [57] J. Moorhouse, M. J. Pritchard, Int. Chem. Eng. Symp. Ser. 71 (1982) 165.
- [58] American Gas Association (1973). LNG Information Book, Arlington, VA: Nat. Tech. Inf. Service.
- [59] G. Mangialavori, F. Rubino, Int. Symp. on Loss Prevention and Safety 2 (1992) 83.
- [60] M. Pritchard, T. Binding, Chem. Eng. Symp. Ser. 130 (1992) 491.
- [61] M. Muñoz, J. Arnaldos, J. Casal, E. Planas, Combust. Flame 139 (2004) 263.
- [62] G. Heskestad, Fire Saf. J. 5 (1983) 103.
- [63] M. J. Pritchard, T. M. Binding, Int. Chem. Eng. Symp. Ser. 71 (1982) 165.
- [64] P. K. Raj, Proc. Saf. J. 24 (2005) 192.
- [65] P. J. Rew, W. G. Hulbert, Development of Pool-Fire Thermal Radiation Model, HSE Contract Research Report No. 96, 1996, ISBN 0717610845; P. J. Rew, W. G. Hulbert, D. M. Deaves; TransICHEME 75 (1997), Part B, 81.
- [66] G. Heskestad, Development of Pool-fire Thermal Radiation Model, P. J. DiNenno et al. (eds.), HSE Contract Research Report No. 96, 1996, ISBN 0717610845.

- [67] H. H. Bruun, Hot-wire Anemometry: Principles and Signal Analysis, Oxford University Press, 1995.
- [68] H. Koseki, T. Yumoto, Fire Techn. 24 (1988) 33.
- [69] F. Durst, A. Melling, J. H. Whitelaw, Principles and Practice of Laser-Doppler Anemometry., Academic Press, 1976.
- [70] Y. Xin, J. P. Gore, K. B. McGrattan, R. G. Rehm, H. R. Baum, Combust. Flame 141 (2005) 329.
- [71] F. Hennig, H. Moser, Temperaturmessung, Springer, 1977.
- [72] H. Russmann, Vergleich verschiedener Verfahren zur experimentellen Bestimmung der Temperaturfelder in laminaren Vormischflammen, Dissertation; RWTH Aachen, 1967.
- [73] R. Rössler, Annalen der Physik 459 (1959) 396.
- [74] G. Näser, W. Peperhoff, Arch. Eisenhüttenwesen 22 (1951) 395.
- [75] M. Dorn, Temperaturmessung an Tankflammen, Dissertation, Universität Stuttgart, 1976.
- [76] P. G. Seeger, Z. VFDB 20 (1971) 74.
- [77] K. B. McGrattan, H. R. Baum, A. Hamins, NISTIR 6546, Fire Safety Engineering Division Building and Fire Research Laboratory, U.S. Department of Commerce, 2002.
- [78] B. M. Cetegen, T. A. Ahmed, Comb. Flame 93 (1993) 157.
- [79] K.-D. Paul, A. Schönbucher, in: Praxis der Sicherheitstechnik, 2006, 7, 175.
- [80] A. Schönbucher, Modelle der thermischen Strahlung großer Feuer, Bedeutung für Industriestandorte, ProcessNET-Jahrestagung 2007, Aachen.
- [81] B. Hägglund, L. E. Persson, FOA Report C20126-D6 (A3), 1976.
- [82] D. Burgess, M. Hertzberg, in N. Afgan und J. Beer: Heat Transfer in Flames, 1974, pp. John Wiley, New York.
- [83] R. Fiala, D. Göck, X. Zhang, A. Schönbucher, Technische Überwachung 33(1) (1992) 137.
- [84] A. Putnam, C. F. Speich, Proc. Combust. Inst. 9 (1963) 867.

- [85] A. A. Putnam, Combust. Flame 7 (1963) 305.
- [86] P. H. Thomas, R. Baldwin, A. J. M. Heselden, Proc. Combust. Inst. 10 (1965) 983.
- [87] R. Baldwin, Comb. Flame 12 (1968) 318.
- [88] O. Sugawa, W. Takahashi, Fire and Mat. 17 (1993) 111.
- [89] D. Kamikawa, W. G. Weng, K. Kagiya, Y. Fukuda, R. Mase, Y. Hasemi, Comb. Flame 142 (2005) 17.
- [90] E. Zukoski, in G. Cox (Ed.), Combustion Fundamentals, Academic Press, San Diego, 1995.
- [91] W. G. Weng, D. Kamikawa, Y. Fukuda, Y. Hasemi, K. Kagiya, Combust. Sci. Technol. 176 (2004) 2123.
- [92] M. Fukuda, Y. Kudo, A. Ito, Bulletin of Japan Association for Fire Science and Engineering 56(3) (2006) 1.
- [93] N. Liu, Q. Liu, Z. Deng, K. Satoh, J. Zhu, Proc. Comb. Inst. 31 (2007) 2589.
- [94] N. Liu, Q. Liu, J. S. Lozano, L. Zhang, Z. Deng, B. Yao, J. Zhu, K. Satoh, Proc. Combust. Inst. 33 (2012) 365.
- [95] Technische Regeln für brennbare Flüssigkeiten (TRbF) 20 - Läger, BArbBl. 4/2001 S. 60, zuletzt geändert BArbBl. 6/2002 S. 63.
- [96] BG RCI, Unfallverhütungsvorschrift Organische Peroxide BGV B4, 1. Januar 2011 mit Durchführungsanweisungen vom Oktober 2000.
- [97] E. E. Zukoski, B. M. Cetegen, T. Kubota, Proc. Combust. Inst. 20 (1985) 361.
- [98] E. E. Zukoski, Combustion Fundamentals of Fire, Academic Press, San Diego,, 1995.
- [99] R. M. Fristrom, A. A. Westenberg, Flame structure, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [100] Medtherm Ltd. Handbook (2006).
- [101] J. H. Ferziger, M. Peric, Computational Methodes for Fluid Dynamics, 2. Aufl., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1997.

- [102] R. B. Bird, M. D. Graham, The Handbook of Fluid Dynamics, CRC Press, 1998.
- [103] H. Oertel, M. Böhle, U. Dohrmann, Strömungsmechanik, 5. Aufl., Vieweg+Teubner, 2009.
- [104] L. Prandtl, Prandtl - Führer durch die Strömungslehre, 11. Aufl., Vieweg Verlag, 2002.
- [105] S. B. Pope, Turbulent Flow, Cambridge Univ. Press, 2000.
- [106] A. R. Paschedag, CFD in der Verfahrenstechnik, Wiley-VCH, 2004.
- [107] L. Prandtl, Zeit. für angew. Math. u. Mech. 5 (1925) 136.
- [108] T. Cebici, A. M. O. Smith, Analysis of Turbulent Boundary Layers, Academic Press, 1974.
- [109] B. S. Baldwin, T. J. Barth, AIAA Paper 910610, 1991, 78.
- [110] A. N. Kolmogorov, Izv. Acad. Sci. USSR 6 (1942) 56.
- [111] L. Prandtl, K. Wieghardt, Nachr. Akad. Wiss. Göttinger Math. Phys. Kl. (1945) 6.
- [112] B. S. Baldwin, T. J. Barth, NASA TM-102847, 1990.
- [113] P. R. Spalart, S. R. Allmaras, AIAA Paper 92 (1992) 439.
- [114] ANSYS FLUENT 13.0, Theory Guide; Benutzerhandbuch, Stand 2010.
- [115] B. E. Launder, D. B. Spalding, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 3 (1974) 269.
- [116] D. C. Wilcox, AIAA Journal 26(11) (1988) 1311.
- [117] D. K. Walters, D. Cokljat, J. Fluid Eng. 34 (2008) 180.
- [118] F. Menter, AIAA Journal 32 (1994) 1598.
- [119] B. E. Launder, G. J. Reece, W. Rodi, J. Fluid Mech. 68 (1975) 537.
- [120] K. Hanjalic, K. B. Launder, J. Fluid Mech. 52 (1997) 609.
- [121] C. G. Speziale, S. Sarkar, T. B. Gatski, J. Fluid Mech. 227 (1991) 245.
- [122] P. R. Spalart, S. Deck, M. L. Shur, K. D. Squires, M. K. Strelets, A. Travin, Theor. Comp. Fluid Dynam. 20 (2006) 181.

- [123] P. Sagaut, Large Eddy Simulation for Incompressible Flows, Springer, 2004.
- [124] D.K. Lilley in NASA Contract Report 93-75, NASA Langly Research Center, 1993.
- [125] S. P. Burke, T. E. W. Schumann, Indust. Eng. Chem. 20 (1928) 1070.
- [126] D. B. Spalding, Proc. Combust. Inst. 13 (1971) 649.
- [127] D. B. Spalding, Combustion and Mass Transfer, Pergamon Press, 1978.
- [128] B. F. Magnussen, H. Hjertager, Proc. Combust. Inst. 16 (1976) 719.
- [129] J. Mathieu, J. Scott, An Introduction to Turbulent Flow, Cambridge Univ. Press, 2000.
- [130] C. Gerthsen, H. Vogel, Physik, Springer, 24. Aufl., 2010.
- [131] R. W. MacCormack, AIAA Paper 69 (1969) 345.
- [132] P. A. Libby, Introduction to Turbulence, Taylor & Francis, 1996.
- [133] R. Borghi, Pro. Energ. Comb. Sci. 14 (1988) 245.
- [134] K. N. C. Bray, J. B. Moos, Acta Astronautica 2 (1977) 291.
- [135] S. H. Frankel, J. P. Drummond, H. A. Hassan, AIAA paper 90 (1990) 1573.
- [136] C. M. Müller, H. Breitenbach, N. Peters, Proc. Combust. Instit. 25 (1994) 1099.
- [137] N. Peters, Prog. Energy Combust. Sci. 10 (1984) 319.
- [138] N. Peters, Combust. Sci. Technol. 30 (1983) 1.
- [139] E. H. Chui, G. D. Raithby, Numerical Heat Trans. Part B 23 (1993) 269.
- [140] G. D. Raithby, E. H. Chui, J. Heat Trans. 112 (1990) 415.
- [141] H. C. Hottel, Heat Transmission, McGraw-Hill, New York, 3rd ed., 1954.
- [142] W. H. Dalzell, A. F. Sarofim, J. Heat Trans. 91 (1969) 100.
- [143] B. F. Magnussen, Modelling NO<sub>x</sub> and Soot Formation by the Eddy Dissipation Concept, First topic oriented Technical Meeting, International Flame Research Foundation, Amsterdam, 1998.

- 
- [144] P. A. Tesner, T. D. Snegirova, V. G. Knorre, *Combust. Flame* 17 (1971) 253.
- [145] K. M. Leung, R. P. Lindstedt, W. P. Jones, *Combust. Flame* 87 (1991) 289.
- [146] S. J. Brookes, J. B. Moos, *Combust. Flame* 116 (1999) 486.
- [147] C. J. Chen, S. Y. Jaw, *Fundamentals of Turbulence Modelling*, Taylor & Francis, 1998.
- [148] I. Vela, CFD prediction of thermal radiation of large, sooty, hydrocarbon pool fires, Dissertation Universität Duisburg Essen, 2009.
- [149] I. Vela, H. Chun, K. B. Mishra, M. Gawłowski, P. Sudhoff, M. Rudolph, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, *Forsch. Ingenieurwes.* 73 (2009) 87.
- [150] H. Chun, K.-D. Wehrstedt, I. Vela, A. Schönbucher, *J. Haz. Mater.* 167 (2009) 105.
- [151] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, *Combust. Flame* 114 (1998) 149.
- [152] K. Jensen, J. F. Ripoll, A. A. Wray, D. Joseph, M. El Hafi, *Combust. Flame* 148 (2007) 263.
- [153] M. Gawłowski, CFD Simulation zur Vorhersage von Interferogrammen, Temperaturen und Spezieskonzentrationen in einer Hexanflamme, Dissertation, Universität Duisburg Essen, 2010.
- [154] M. Schäfer, *Numerik im Maschinenbau*, Springer, 1999.
- [155] A. Hamins, J. C. Yang, T. Kashiwagi, A Global Model for Prediction the Mass Burning Rates of Liquid Pool Fires, NISTIR 6381.
- [156] A. Nakakuki, *Fire Saf. J.* 23 (1994) 339.
- [157] D. R Lide (ed.), *Handbook of chemistry and physics*, New York, 76th ed., 6-112, 1996.
- [158] X.-R. Li, H. Koseki, *J. Loss Prevent. Proc.* 18 (2005) 460.
- [159] L. Chun-Ping, T. Jo-Ming, C. Yi-Ming, *J. Loss Prevent. Proc.* 5(1) (2012) 1.
- [160] M. Malow, K.-D. Wehrstedt, *J. Hazard. Mater.* A120 (2005) 21.

- [161] B. Cheng, S.-X. Lu, C.-H. Li, Q.-S. Kang, V. Lecoustre, J. Hazard. Mater. 188 (2011) 369.
- [162] L. Orloff, J. de Ris, Froude modeling of pool fires, Factor Mutual Technical Report No. OHON 3.BU RC81-BT-9, Factory Mutual Research, Nordwood, MA, 1983.
- [163] L. Orloff, J. de Ris, Proc. Combust. Inst. 9 (1983) 885.
- [164] VDI-Wärmeatlas, Strahlung technischer Oberflächen, Kb5, 10. Aufl., Springer, Berlin, 2006.
- [165] H. Bockhorn, persönliche Mitteilung.
- [166] A. V. Tobolsky, R. B. Mesrobian, Organic Peroxides, Interscience Publishers, New York, 63, 1994.
- [167] J. F. Griffith, J. R. Mullins, Comb. Flame 56 (1984) 135.
- [168] J. F. Griffith, W. Kordylewski, Archivum Combustionis 14(1-2) (1994) 83.
- [169] E. Brandes, W. Möller, Safety characteristic data, volume 1: Flammable liquids and gases, Wirtschaftsverlag NW, Bremerhaven, 356, 2008.
- [170] E. Goos, A. Burcat, Rate constant calculation of thermal reactions: Methods and applications, Wiley & Sons, New York, 2011.
- [171] E. Gimzenski, G. Audley, Thermochimica acta 214 (1993) 129.
- [172] P. J. Rew, D. M. Deaves, SERA, The validation and application of pool fire models 4 (1995) 1.
- [173] W. L. Oberkampf, M. F. Barone, J. Comput. Phys. 217 (2006) 5.
- [174] P. K. Raj, J. Haz. Mater. 159 (2008) 61.
- [175] K. Buettner, J. Appl. Physiology 3 (1951) 517.
- [176] DIN EN 1473:2007-06, Anlagen und Ausrüstung für Flüssigerdgas – Auslegung von landseitigen Anlagen, Beuth-Verlag.



# Publikationsliste

## Zeitschriften und Buchbeiträge

S. Schälike, K. B. Mishra, M. Malow, A. Berger, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Mass burning rates of a large TBPB pool fires – experimental study and modeling, Chem. Eng. Trans., 31 (2013) 831.

S. Schälike, H. Chun, K. B. Mishra, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Mass burning rates of di-tert-butyl peroxide pool fires – experimental study and modeling, Combust. Sci. Technol., 3 (2013) 408.

S. Schälike, A. Schönbucher, Pool fires, in U. Hauptmanns (Ed.) Plant and Process Safety Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry 8th edition, 2012, chapter 6, risk analysis, 52-60.

S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Flame heights of di-tert-butyl peroxide pool fires - experimental study and modelling, Chem. Eng. Trans., 26 (2012) 363.

S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, M. Gawlowski, A. Schönbucher, Validation of submodels for CFD simulation of n-hexane pool flames including interferometry, Chem. Ing. Tech., 84(4) (2012) 484.

A. Schönbucher, S. Schälike, I. Vela, K.-D. Wehrstedt, CFD simulation of large hydrocarbon and peroxide pool fires, in J. Schmidt (Ed.) Process and plant safety - Applying computational fluid dynamics, Wiley-VCH, 2012, Chapter 9, 139.

S. Schälike, I. Vela, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Vorhersage der kritischen thermischen Abstände von LNG-Poolfeuern, 10. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit, Köthen 2010, 1.

## Tagungsbände

S. Schälike, K. B. Mishra, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Experimentelle Untersuchung der Massenabbrandraten multipler n-Heptan und Di-tert-butylperoxid Poolfeuer, 3. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag, 2013, 1.

S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, CFD simulation to predict the thermal radiation of large LNG pool fires, Proc. 5th European combustion meeting, Cardiff, 2011, 1.

S. Schälike, I. Vela, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Vorhersage der thermischen Strahlung von KW-Poolfeuern mit CFD-Simulation, Proc. Workshop Brandschutzvortrag, Magdeburg, 2011, 1.

## **Vorträge**

S. Schälike, K. B. Mishra, M. Malow, A. Berger, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Mass burning rates of a large TBPB pool fires – experimental study and modeling, 14th International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries, Florenz, 2013.

K.-D. Wehrstedt, S. Schälike, A. Schönbucher, Mass burning rates of organic peroxides including a liquid phase decomposition reaction, IGUS EOS Meeting, Verneuil-en-Halatte, 2013.

S. Schälike, K. B. Mishra, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Experimentelle Untersuchung der Massenabbrandraten multipler n-Heptan und Di-tert-butylperoxid Poolfeuer, 3. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag, Magdeburg, 2013.

S. Schälike, D. Göck, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Probability density functions for hot spots and smoke parcels in hydrocarbon pool fires and fundamentals of multiple fires,ACHEMA 2012, Frankfurt am Main, 2012.

S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Flame heights of di-tert-butyl peroxide pool fires - experimental study and modeling, 5th International Conference on Safety and Environment in Process and Power Industry, Mailand, 2012.

S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Mass burning rates of organic peroxides including a liquid phase decomposition reaction, IGUS EOS Meeting, Berlin, 2012.

S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Multiple fires of organic peroxides and hydrocarbons, IGUS EOS Meeting, Berlin, 2012.

A. Schönbucher, S. Schälike, I. Vela, K.-D. Wehrstedt, CDF zur Simulation großer

Kohlenwasserstoff/Peroxid-Poolfeuer, 50. Tutzing-Symposium CDF-Die Zukunft der Sicherheitstechnik?, Tutzing, 2011.

S. Schälike, I. Vela, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Vorhersage der kritischen thermischen Abstände von LNG-Poolfeuern, 10. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit, Köthen, 2010.

S. Schälike, I. Vela, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, Vorhersage der thermischen Strahlung von KW-Poolfeuern mit CFD-Simulation, Workshop Brandschutzforschung des Technisch-Wissenschaftlichen Beirates der Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e. V., Magdeburg, 2010.

## **Poster**

S. Schälike, K. B. Mishra, K.-D. Wehrstedt, H. Chun, I. Vela, A. Schönbucher, Surface emissive power of organic peroxide and hydrocarbon pool fires - experimental and CFD simulation, 8th European Congress of Chemical Engineering, Berlin, 2011.

S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbucher, CFD Simulation to predict the thermal radiation of large LNG pool fires, 5th European Combustion Meeting ECM 2011, Cardiff, 2011.



# Lebenslauf

## Persönliche Daten:

M. Sc. Stefan Schälike  
Mittelstr. 23  
13055 Berlin

Tel.: 030/8104-4467  
E-Mail: stefan.schaelike@uni-due.de

Geb. am 25.08.1982 in Oberhausen  
ledig, deutsch

## Hochschulbildung:

04/2010-06/2013 Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Technische Chemie I und Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung Fachbereich Reaktionsfähige Stoffe und Stoffsysteme

Promotion zum Dr. rer nat.

Dissertation: Einfluss der thermischen Stabilität organischer Peroxide auf quelltermrelevante Wärmeströme wechselwirkender Feuer

10/2007-03/2010 Universität Duisburg-Essen, Studiengang M. Sc. Chemie, Vertiefungsrichtung: Technische Chemie,

Masterarbeit: Untersuchung von Submodellen zur CFD-Simulation von LNG-Poolfeuern

03/2007-09/2007 Universität Duisburg-Essen, Studiengang B. Sc. Water Science, Vertiefungsrichtung: Physikalisch-Organische Chemie Bachelorarbeit: Synthesis and assembly behavior of giant

amphiphiles based on polystyrene bovine serum albumin  
model system

03/2007-09/2007 Auslandsaufenthalt am Institute for Molecules and Materials,  
Radboud Universiteit Nijmegen

### **Zivildienst:**

09/1993-04/2004 Zivildienst beim Deutschen Roten Kreuz  
Einsatz als Rettungshelfer

### **Schulbildung:**

08/1993-06/2003 Freiherr-vom-Stein Gymnasium Oberhausen  
Abschluss: Allgemeine Hochschulreife

07/2002-07/1993 Praktikum im Zentrallaboratorium eines Krankenhauses

08/1989-07/1993 Städtische Gemeinschaftsgrundschule

Berlin, 15.05.2013